ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Լ Ր Ա Բ Ե Ր

ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ

ՍԵՐԻԱ

ՖԻԶԻԿԱՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ
ԵՎ ԲՆԱԿԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

№ 1

ՀՌՀ Հրատարակչություն

Երևան 2018

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

В Е С Т Н И К

РОССИЙСКО-АРМЯНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

№ 1

Издательство РАУ

Ереван 2018

Печатается по решению Ученого совета РАУ

Вестник РАУ, № 1. – Ер.: Изд-во РАУ, 2018. – 80 с.

Журнал входит в перечень периодических изданий,
зарегистрированных ВАК РА и в базу данных РИНЦ

Российско-Армянский университет, 2018 г.

ISBN 1829-0450

МАТЕМАТИКА

УДК 510.64

ON SOME PROPERTIES OF SEVERAL PROOF SYSTEMS FOR NON CLASSICAL PROPOSITIONAL LOGICS

A. Chubaryan[1], A. Karabakhtsyan[2], G. Petrosyan[3]

[1]Yerevan State University, Russian-Armenian University
[2]Russian-Armenian University
[3]Yerevan State University

achubaryan@ysu.am, arman.karabakhtsyan@gmail.com,
garik.petrosyan.1@gmail.com

ABSTRACT

In this work we investigate 1) the relations between the proofs complexities of strongly equal tautologies and 2) the relations between the proofs complexities of minimal tautologies and of results of substitutions in them for some sequent propositional systems of intuitionistic, Johansson's and monotone logics. We show that 1) strongly equal tautologies can have essential different proof complexities in the same system and 2) the result of substitution can be proved easier, than corresponding minimal tautology, therefore the systems, which are considered in this paper, are no monotonous neither by lines nor by size.

Keywords: strongly equal tautologies, minimal tautology, sequent proof systems, proof complexity measures, monotonous system.

1. **Introduction.** The traditional assumption that all tautologies as Boolean functions are equal to each other is not fine-grained enough to support a sharp distinction among tautologies. The authors of [1] have provided a different picture of equality for classical tautologies. They have introduced in [2] the notion of "determinative conjunct", on the basis of which the notion of strong equality of classical tautologies was suggested in [1]. The idea to revise the notion of equivalence between tautologies in such way that is takes into account an appropriate measure of their "complexity".

The relations between the proof complexities of strongly equal classical tautologies in some proof systems are investigated in [3-5]. It was proved that the strongly equal tautologies have the same proof complexities in some "weak" proof systems, but the measures of proof complexities for strongly equal tautologies can be essentially different in the most traditional proof systems of Classical Logic (Frege systems, substitution Frege systems, sequent systems with and without cut rule). In this work we introduce the notions of strongly equal non-classical tautologies and show that the proof complexities of strongly equal non-classical tautologies can be also essentially different in some sequent propositional systems of intuitionistic, Johansson's and monotone logics.

The second theme of our investigation is connected with relation between the proof complexities of minimal tautologies, i.e. tautologies, which are not a substitution of a shorter tautology, and results of a substitution in them. There is traditional assumption that minimal tautology must be no harder than any substitution in it. We introduce for the propositional proof systems the notions of monotonous by lines and monotonous by sizes of proofs. In [6,7] it is proved that many traditional classical proof systems of 2-valued and many-valued logics are no

monotonous neither by lines nor by size. Here we prove the analogous result for some systems of non-classical propositional logic as well.

2. **Preliminaries.** We will use the current concepts of a propositional formula, a classical tautology and non-classical tautologies, sequent, sequent systems for non-classical propositional logic [8] and proof complexity [9]. Let us recall some of them.

2.1. The considered sequent systems.

Sequent system uses the denotation of sequent $\Gamma \to \Delta$ where Γ (antecedent) and Δ (succedent) are finite (may be empty) sequences of propositional formulas.

For every formula $C$and for any sequence of formulas Γ the axiom scheme of propositional intuitionistic (***PI***) system is $C, \Gamma \to C.$ For every formulas A , B, for any sequence of formulas Γ and sequence Δ, which is empty or consists of one formula, the logic rules are.

$$\supset\to \frac{A\supset B,\Gamma\to A \text{ and } B,\Gamma\to\Delta}{A\supset B,\Gamma\to\Delta} \quad \to\supset \frac{A,\Gamma\to B}{\Gamma\to A\supset B}$$

$$\vee\to \frac{A, A\vee B, \Gamma \to \Delta \text{ and } B, A\vee B, \Gamma \to \Delta}{A\vee B, \Gamma \to \Delta} \to\vee \frac{\Gamma \to A \text{or} \Gamma \to B}{\Gamma \to A \vee B}$$

$$\wedge\to \frac{A, A\wedge B, \Gamma \to \Delta \text{or} B, A\wedge B, \Gamma \to \Delta}{A\wedge B, \Gamma \to \Delta} \to\wedge \frac{\Gamma \to A \text{and} \Gamma \to B}{\Gamma \to A \wedge B}$$

$$\neg\to \frac{\neg A, \Gamma \to \ A}{\neg A, \Gamma \to \Delta} \to \neg \frac{A, \Gamma \to}{\Gamma \to \neg A}$$

For propositional Johansson's (minimal) system (***PM***) axiom sxeme and inference rules are the same, but Δ must be empty [9]. Note that the order of formula ocurences in antecedents (succedents) are immaterial in above systems.

The propositional monotone system (***PMon***), where only monotonous logical functions are used for construction of formulas, we define follow [10].

The axioms of ***PMon*** system are $A \to A, \bot \to \Gamma, \Gamma \to T,$

where A is any formula, Γ is sequence of formulas, by $\perp$ and T are denoted "false" and "truth" accordingly

For every formulas A , B and for any sequence of formulas Γ, Γ', Δ and Δ' the inference rules are.

$$(L_1)\frac{\Gamma, A, A, \Delta \to \Gamma'}{\Gamma, A, \Delta \to \Gamma'}\ (L_2)\frac{\Gamma, A, B, \Delta \to \Gamma'}{\Gamma, B, A, \Delta \to \Gamma'}\ (L_3)\frac{\Gamma \to \Gamma'}{\Gamma, A \to \Gamma'}\ (L_4)\frac{A, B, \Gamma \to \Delta}{A \wedge B, \Gamma \to \Delta'},$$

$$(L_5)\frac{A, \Gamma \to \Delta \text{ and } B, \Gamma' \to \Delta'}{A \vee B, \Gamma, \Gamma' \to \Delta, \Delta'}$$

$$(R_1)\frac{\Gamma' \to \Gamma, A, A, \Delta}{\Gamma' \to \Gamma, A, \Delta}\ (R_2)\frac{\Gamma' \to \Gamma, A, B, \Delta}{\Gamma' \to \Gamma, B, A, \Delta}\ (R_3)\frac{\Gamma' \to \Gamma}{\Gamma' \to \Gamma, A}\ (R_4)\frac{\Gamma \to \Delta, A, B}{\Gamma \to \Delta, A \vee B}$$

$$(R_5)\frac{\Gamma \to \Delta, A \text{ and } \Gamma' \to \Delta', B}{\Gamma, \Gamma' \to \Delta, \Delta', A \wedge B}$$

To all above systems can be added cut-rule of inference $\frac{\Gamma \to \Delta, A \ A, \Gamma' \to \Delta'}{\Gamma, \Gamma' \to \Delta, \Delta'}$.

We use the well known notion of proof in all above systems.

Any sequent $\Gamma \to \Delta$ is called I-valid sequent (M-valid sequent, Mon-valid sequent) if it is deduced in the system ***PI (PM, PMon)***. Any formula A is called I-tautology or M-tautology if sequent $\to A$ is deduced in the corresponding system ***PI*** or ***PM.*** Any formula A⊃B is called Mon-tautology if sequent $A \to B$ is deduced in the system ***PMon.***

Let $\Gamma \to \Delta$ be some sequent, where Γ is a sequence of formulas $A_1, A_2, \dots, A_l$ $(l \geq 0)$ and Δis a sequence of formulas $B_1, B_2, \dots, B_m$ $(m \geq 0)$. The formula form of sequent (f.f.s.) $\Gamma \to \Delta$ is the formula $\varphi_{\Gamma \to \Delta}$, which is defined usually as follows:

1) $A_1 \wedge A_2 \wedge \dots \wedge A_l \supset B_1 \vee B_2 \vee \dots \vee B_m l, m \geq 1$,
2) $A_1 \wedge A_2 \wedge \dots \wedge A_l \supset \perp$ for ≥ 1 , $m = 0$,
3) $B_1 \vee B_2 \vee \dots \vee B_m$ for $l = 0$ and $m \geq 1$.

It is well-known that $\Gamma \to \Delta$ is ***classical (intuitionistic, Johansson's, monotone) valid sequent iff its f.f.s. is classical (intuitionistic, Johansson's, monotone) tautology.***

For every inference rule $\frac{D}{E}$ ($\frac{D and D'}{E}$) we call ***inference formula form (i.f.f.)*** the formula *f.f.s.D⊃f.f.s.E* (*f.f.s.D⊃(f.f.s.D'⊃f.f.s.E)*).

Sometimes we'll use term *tautology* (*valid sequent*) for all types of above mentioned tautology (valid sequent) further.

2.2. Some properties of tautologies (valid sequents).

2.2.1. Determinative disjunctive normal forms

Following the usual terminology we call the variables and negated variables literals for classical logic. The conjunct K (clause) can be represented simply as a set of literals (no conjunct contains a variable and its negation simultaneously).

In [1,2] the following notions were introduced for classical logic. Each of the under-mentioned trivial identities for a propositional formula ψ is called *replacement-rule:*

$$0\&\psi = 0, \psi\&0 = 0, 1\&\psi = \psi, \psi\&1 = \psi, 0 \vee \psi = \psi, \psi \vee 0 = \psi,$$
$$1 \vee \psi = 1, \psi \vee 1 = 1,$$
$$0 \supset \psi = 1, \psi \supset 0 = \neg\psi, 1 \supset \psi = \psi, \psi \supset 1 = 1, \neg 0 = 1,$$
$$\neg 1 = 0, \neg\neg\psi = \psi.$$

Application of a replacement-rule to some word consists in the replacing of some its subwords, having the form of the left-hand side of one of the above identities, by the corresponding right-hand side.

Let φ be a propositional formula, $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ be the set of all variables of φ, and $P' = \{p_{i_1}, p_{i_2}, \dots, p_{i_m}\}$ $(1 \le m \le n)$ be some subset of P.

Definition 2.2.1.1. Given $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m\} \subset E^m$, the conjunct $K^\sigma = \{p_{i_1}^{\sigma_1}, p_{i_2}^{\sigma_2}, \dots, p_{i_m}^{\sigma_m}\}$ is called $\varphi - 1$ – determinative ($\varphi - 0$ – determinative) if assigning $\sigma_j (1 \le j \le m)$ to each p_{ij} and successively using replacement-rules we obtain the value of φ (1 or 0) independently of the values of the remaining variables.

Definition 2.2.1.2. DNF $D = \{K_1, K_2, \dots, K_j\}$ is called determinative DNF (DDNF) for φif φ = D and every conjunct $K_i (1 \le i \le j)$ is 1-determinative for φ.

Definition 2.2.1.3. DNF $D = \{K_1, K_2, \dots, K_j\}$ is called determinative DNF (dDNF) for φif φ = D and every conjunct $K_i (1 \le i \le j)$ is 1-determinative for φ.

Some arguments for the following definition were given in [1].

The classical tautologies φ *and* ψ *are strongly equal if every determinative conjunct for* φ *is determinative conjunct for* ψ *and vice versa.*

It is not difficult to see, that dDNF for classical tautology can be constructed directly. As the non-classical validity is determined by derivability in some accordingly propositional proof system, the above definition of dDNF for non-classical tautologies is not applicable. In [2] some algorithm for construction of dDNF for classical tautologies on the base of their resolution refutations was given. The analogies of dDNF for intuitionistic and Johansson's tautologies ($\varphi -$ I-determinative DNF and $\varphi -$ M-determinative DNF accordingly) were constructed on the base of proofs in intuitionistic and minimal resolution systems [11], where were showed, in particularly, that***only variables with one or double negations are the literals in I-determinative conjuncts and*** $\boldsymbol{p} \supset \perp$ ***and*** $(\boldsymbol{p} \supset \perp) \supset \perp$ ***type formulas are literals inM-determinative conjuncts.*** The Mon-determinative DNF for every Mon-tautology A⊃B can by constructed by analogy on the base of some ***PMon***-proofof sequent A→ B .As literals for *monotone* logic can be p^+ and p^-, depending of positive or negative occurrence of variable p in the axioms of ***PMon***-proofof sequent A→ B .

Definition 2.2.1.4. DNF is called dDNF for a valid sequent if it is dDNF for its f.f.s..

Main definition 1.The classical (intuitionistic, Johansson's) tautologies φ ***and*** ψ ***are strongly equal if every dDNF (I-dDNF, M-dDNF) for*** $\boldsymbol{\varphi}$ ***is dDNF (I-dDNF, M-dDNF) for*** $\boldsymbol{\psi}$ ***and vice versa. The classical***

(intuitionistic, Johansson's, monotone) valid sequents $\Gamma \to \Delta$ ***and*** $\Gamma' \to \Delta'$ ***are strongly equal if every dDNF (I-dDNF, M-dDNF, Mon-dDNF) for*** $\Gamma \to \Delta$ ***is dDNF (I-dDNF, M-dDNF, Mon-dDNF) for*** $\Gamma' \to \Delta'$ ***and vice versa.***

2.3. Essential subformulas of tautologies (valid sequents)

We generalize for non-classical tautologies the notion of *essential subformulas*, introduced in [12].

Let F be some formula and $Sf(F)$ be the set of all non-elementary subformulas of formula F. For every formula F, for every $\varphi \in Sf(F)$ and for every variable p by F_{φ}^{p} is denoted the result of the replacement of the subformulas φ everywhere in F by the variable p. If $\varphi \notin Sf(F)$, then F_{φ}^{p} is F.

We denote by $Var(F)$ the set of all variables in F.

Definition 2.3.1. Let p be some variable that $p \notin Var(F)$ and $\varphi \in Sf(F)$ for some classical tautology (I-tautology, M-tautology, Mon-tautology) F. We say that φ is an ***essential subformula*** in F iff F_{φ}^{p} is ***not classical*** tautology.

The set of essential subformulas in tautology F we denote by *Essf(F)*, the number of essential subformulas – by *Nessf(F)* and the sum of sizes of all essential subformulas by *Sessf(F).*

Definition 2.3.2. A tautolgy is called ***minimal*** if it is not a substitution of a shorter tautology.

Definition 2.3.3. Sequent $\Gamma \to \Delta$ is called **minimal valid** if its formula form $\varphi_{\Gamma\to\Delta}$ is minimal tautology.

We denote by $S(\varphi)$ the set of all formulas, every of which is result of some substitution in a minimal tautology φ.

If F is minimal tautology, then $Essf(F) = Sf(F)$.

Definition 2.3.3. The subformula φ is essential for valid sequent $\Gamma \to \Delta$ if it is essential for its formula form.

Proposition 2.3. Let $\mathcal{F}$ be some of above proof system (with and without cut rule), F be a valid sequent and $\varphi \in Essf(F)$, thena)in every $\mathcal{F}$-proof of F subformula φ must be essential either at least in some axiom, used in proof or in i.f.f. for some used in proof inference rule,b)there is some constant c such that the number of essential subformulas for every axiom of $\mathcal{F}$ and of i.f.f. for every inference rule of $\mathcal{F}$ is no more, than c.

Both statements of this Proposition can be proved by immediate examination every of axioms and inference rules in each of above systems. The analogous statements for traditional proof systems of classical systems are proved in [12].

2.4. Proof complexity measures

By $|\varphi|$ we denote the size of a formula φ, defined as the number of all logical signs in it. It is obvious that the full size of a formula, which is understood to be the number of all symbols is bounded by some linear function in $|\varphi|$.

In the theory of proof complexity two main characteristics of the proof are: ***t-complexity*** (length), defined as the number of proof steps, ***l-complexity*** (size), defined as sum of sizes for all formulas in proof [13].

Let Φ be a proof system and $\Gamma \rightarrow \Delta$ be a valid sequent. We denote by $t^{\phi}_{\Gamma\rightarrow\Delta}$ ($l^{\phi}_{\Gamma\rightarrow\Delta}$) the minimal possible value of t-complexity (l-complexity) for all Φ-proofs of $\Gamma \rightarrow \Delta$.

Main Definition 2. Sequent proof system Φ is called t-monotonous (l-monotonous) if for every valid sequent $\Gamma \rightarrow \Delta$ and for every sequent $\Gamma_1 \rightarrow \Delta_1$ such that $\varphi_{\Gamma_1\rightarrow\Delta_1} \in S(\varphi_{\Gamma\rightarrow\Delta})$ $t^{\phi}_{\Gamma\rightarrow\Delta} \leq t^{\phi}_{\Gamma_1\rightarrow\Delta_1}$ ($l^{\phi}_{\Gamma\rightarrow\Delta} \leq l^{\phi}_{\Gamma_1\rightarrow\Delta_1}$).

3. Main Results

3.1. Auxiliary statements. Before we prove the main theorems, at first we must give some easy proved auxiliary statements. Let us consider the following sequences of sequents:

$$D_n = p \rightarrow \overbrace{p \vee (p \vee (p \vee \ldots \vee (p \vee p) \ldots))}^{n},$$

$$E_n = p \rightarrow \overbrace{p \wedge (p \wedge (p \wedge \ldots \wedge (p \wedge p) \ldots))}^{n},$$

$$F_n = p \rightarrow q \vee \overbrace{p \wedge (p \wedge (p \wedge \ldots \wedge (p \wedge p) \ldots))}^{n},$$

$$G_n = p \rightarrow (p \wedge p) \vee \overbrace{p \wedge (p \wedge (p \wedge \ldots \wedge (p \wedge p) \ldots))}^{n}.$$

Lemma 3.1.

a) There are constants c_1, c_2, c_3 and c_4 such, that for every n

$\boldsymbol{t_{D_n}^{PMon}} \le c_1, \boldsymbol{t_{G_n}^{PMon}} \le c_2$ and $\boldsymbol{l_{D_n}^{PMon}} \le c_3\, n$, $\boldsymbol{l_{G_n}^{PMon}} \le c_4\, n$.

b) There are constants k_1, k_2, k_3 and k_4 such, that for every n

$\boldsymbol{t_{E_n}^{PI}} \ge k_1 n, \boldsymbol{t_{F_n}^{PI}} \ge k_2 n$ and $\boldsymbol{l_{E_n}^{PI}} \ge k_3 n^2$, $\boldsymbol{l_{F_n}^{PI}} \ge k_4 n^2$.

Proof of point a) is obviously. Really for every n sequent D_n can be proved in ***PMon*** as follow

$$\frac{\dfrac{p \rightarrow p}{p \rightarrow p, \overbrace{p \vee (p \vee (p \vee \ldots \vee (p \vee p) \ldots))}^{n-1}}}{Dn}$$

For every n sequent G_n can be proved in ***PMon*** as follow

$$\frac{\dfrac{\dfrac{p \rightarrow p \text{ and } p \rightarrow p}{p \rightarrow p \wedge p}}{p \rightarrow p \wedge p, \overbrace{p \wedge (p \wedge (p \wedge \ldots \wedge (p \wedge p) \ldots))}^{n}}}{Gn}$$

For proving of point b) note that for each i $(1 \le i \le n)$ the formula $\overbrace{p \wedge (p \wedge \ldots \wedge (p \wedge p) \ldots))}^{i}$ is essential both for E_n and F_n, therefore $Nessf(E_n) \ge n$, $Nessf(F_n) \ge n$ and $Sessf(E_n) \ge n^2/2$, $Sessf(E_n) \ge n^2/2$. Now we must use the statements of both points from Propositional 2.3. ∧

Corollary. Above statements for sequents D_n and E_n are true in the systems ***PI*** and ***PM*** as well. Above statements for sequents G_n and F_n are true in the systems ***PM*** and ***PMon*** as well.

Theorem 1. a) The ***intuitionistic, Johansson's*** and ***monotone valid*** seguents $\boldsymbol{D_n}$and $\boldsymbol{E_n}$are strongly equal.

b) For every of above mentioned system $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ (with and without cut rule) $\boldsymbol{t^{\mathcal{F}}_{D_n}}$ = **O(1)**and $\boldsymbol{l^{\mathcal{F}}_{D_n}}$ = **O(n),** but$\boldsymbol{t^{\mathcal{F}}_{E_n}}$ = $\Omega(n)$and$\boldsymbol{l^{\mathcal{F}}_{E_n}}$ = $\Omega(n^2)$.

Proof. It is not difficult to see that ***I-dDNF*** of $\boldsymbol{D_n}$and $\boldsymbol{E_n}$is $\{\neg p, \neg\neg p\}$, ***M-dDNF*** of$\boldsymbol{D_n}$and $\boldsymbol{E_n}$is$\{p \supset\perp, (p \supset\perp) \supset\perp\}$**,** and ***Mon-dDNF*** of$\boldsymbol{D_n}$and $\boldsymbol{E_n}$ is $\{ p^{+}, p^{-}\}$, therefore seguents $\boldsymbol{D_n}$and $\boldsymbol{E_n}$are strongly equal.

Proof of point b) follows from Corollary of Lemma 3.1.

Theorem 2. Every of above mentioned systems $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ (with and without cut rule) is neither *t-monotonous* nor *l-monotonous*.

Proof. It is not difficult to see that for every *n* sequent F_n is minimal valid sequent and corresponding sequent G_n is result of substitution in F_n. From Corollary of Lemma 3.1. it is follow that $\boldsymbol{t^{\mathcal{F}}_{G_n}}$ = **0(1)**and $\boldsymbol{l^{\mathcal{F}}_{G_n}}$ =**0(n),**but $\boldsymbol{t^{\mathcal{F}}_{F_n}}$ = $\Omega(n)$and $\boldsymbol{l^{\mathcal{F}}_{F_n}}$ = $\Omega(n^2)$**.**

4. Discussion. We want to note, that for every *n* the sequent G_n is result of substitution in the other minimal valid sequent $p \longrightarrow (p \wedge p) \vee q$, *t*-complexity and l-complexity of which is bounded by some constant in all above mentioned systems. We can introduce the following definition: ***the sequent proof system Φ is called t-strongly monotonous (l -strongly monotonous) if for every valid sequent$\boldsymbol{\Gamma \to \Delta}$ there is minimal valid sequent $\boldsymbol{\Gamma_1 \to \Delta_1}$ such that $\boldsymbol{\varphi_{\Gamma\to\Delta} \in}$ S($\boldsymbol{\varphi_{\Gamma_1\to\Delta_1}}$) and $\boldsymbol{t^{\phi}_{\Gamma_1\to\Delta_1} \leq t^{\phi}_{\Gamma\to\Delta}}$ ($\boldsymbol{l^{\phi}_{\Gamma_1\to\Delta_1} \leq l^{\phi}_{\Gamma\to\Delta}}$).*** It is interesting to investigate the following problem: are the above non-classical systems as well as the classical systems strongly monotonous? It seems that answer must be positive. Analogous question for tree like proofs was stated in [14]. Investigation of this questions are in process.

REFERENCES

1. *Chubaryan A., Chubaryan A.* Definition of Strong Equality of Tautologies and Universal System for Various Propositional Logics, Armenian Journal of Mathematics, V. 1, № 2, 2008, 29–35.
2. *Chubaryan A.A.* On complexity of the proofs in Frege system, CSIT Conference, Yerevan, 2001, 129–132.
3. *Chubaryan A., Chubaryan A., Mnatsakanyan A.* Proof complexities of strongly equal classical tautologies in some proof systems, Nauka i Studia, NR 42 (110) 2013, PP. 92–98.
4. *Chubaryan A., Petrosyan G.* Frege systems are no monotonous, Evolutio, Естественныенауки, вып. 3, 2016, 12–14.
5. *Chubaryan A., Petrosyan G.* On some properties of several proof systems for 2-valued and 3-valued propositional logic, Fundamentalis Scientiam, Vol.8(8), Spain, 2017, 70–73.
6. *Chubaryan A., Petrosyan G.* Frege systems are no monotonous, Evolutio, Естественные науки, вып. 3, 2016, 12–14.
7. *Chubaryan A., Nalbandyan H., Karabakhtsyan A., Petrosyan G.* Propositional sequent systems of two valued classical logic and many valued logics are no monotonous, ASL, ESM, Logic Colloquium – 2017, Stockholm, Abstracts, Programme and Abstracts, LC2017-Book, 98.
8. *Kleene S.C.* Introduction to Metamathemics, D.Van Nostrand Company, INC, 1952.
9. *Чубарян А., Болибекян О. О секвенциальных системах слабых* арифметик, ДНАН Армении, Прикладная математика, 2002, 102, т. 3, 214–218.
10. *Atserias A., Galesi N., Gavalda R. Monotone Proofs of the Pigeon Hole* Principle, Mathematical Logic Quarterly, 47, 2001, 4, 461–474.
11. *Chubaryan A., Chubaryan A., Nalbandyn H., Sayadyan S.* A Hierarchy of Resolution Systems with Restricted Substituted Rules, Computer

Technology and Applications, David Publishing, USA, Vol.3, № 4, 2012, 330–336.

12. *Chubaryan A.A.* Comparison of proof sizes in systems and substitution systems of Frege, Izvestiya NAN Armenii, Matematika, vol. 35, No. 5, 2002, 71–84.
13. *Filmus Y., Lauria M., Nordstrom J., Thapen N., Ron-Zewi N.* 2012, Space Complexity in Polynomial Calculus, 2012 IEEE Conference on Computational Complexity (CCC), 334–344.
14. *Аникеев А.С.* О некоторой классификации выводимых пропозициональных формул, Математические заметки, 11, вып. 2, 1972, 165–174.

О РЯДЕ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ ПРОПОЗИЦИОНАЛЬНЫХ СИСТЕМ ВЫВОДОВ НЕКЛАССИЧЕСКИХ ЛОГИК

А. Чубарян, А. Карабахцян, Г. Петросян

АННОТАЦИЯ

В данной работе мы исследуем: 1) отношения между сложностями выводов строго эквивалентных тавтологий и 2) отношения между сложностями выводов минимальных тавтологий и результатов подстановки в них для некоторых пропозициональных секвенциальных систем интуиционистской, Иогансоновской и монотонных логик. Доказано, что 1) строго эквивалентные тавтологии могут иметь совершенно различные сложности выводов в одной и той же системе и 2) результат подстановки может быть выведен проще, чем соответствующие минимальные тавтологии, следовательно, рассмотренные в этой статье системы не монотоничны ни по шагам, ни по длине выводов.

Ключевые слова: строго эквивалентные тавтологии, минимальная тавтология, секвенциальные системы выводов, величины сложностей выводов, монотонические системы.

ՈՉ ԴԱՍԱԿԱՆ ՏՐԱՄԱԲԱՆՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱՍՈՒՅԹԱՅԻՆ ՀԱՇՎԻ ՈՐՈՇ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ՄԻ ՇԱՐՔ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Ա. Չուբարյան, Ա. Ղարաբաղցյան, Գ. Պետրոսյան

ԱՄՓՈՓՈւՄ

Սույն աշխատությունում մենք հետազոտել ենք ինտուիցիոնիստական, Յոհանսոնի և մինիմալ տրամաբանությունների ասույթային հաշվի որոշ համակարգերում 1) խիստ համարժեք նույնաբանությունների արտածումների բարդությունների հարաբերությունը և 2) հարաբերությունները մինիմալ նոյնաբանությունների և նրանցից տեղադրությամբ ստացված արտածումների բարդությունների միջև: Ապացուցվել է, որ 1) միննույն համակարգերում խիստ համարժեք նույնաբանությունները արտածումների կարող են ունենալ էապես տարբերբարդություններ և 2) տեղադրման արդյունքը կարող է արտածվել ավելի պարզ, քան մինիմալ նույնաբանությունը, հետևաբար, սույն հոդվածում դիտարկված համակարգերը մոնոտոնիկ չեն ոչ ըստ արտածման քայլերի, ոչ ըստ նրա երկարության:

Հիմնաբառեր՝ խիստ համարժեք նույնաբանություններ, մինիմալ նույնաբանություններ, արտածումների սեկվենցիալ համակարգեր, արտածումների բարդության մեծություններ, մոնոտոնիկ համակարգեր:

УДК 517.518.23

ГИПОЭЛЛИПТИЧНОСТЬ И ПОЧТИ ГИПОЭЛЛИПТИЧНОСТЬ В ТЕРМИНАХ СРАВНЕНИЯ ПОДМНОГОЧЛЕНОВ

В.Н.Маргарян

Российско-Армянский университет

vachagan.margaryan@yahoo.com

АННОТАЦИЯ

В работе найдены необходимые, достаточные условия гипоэллиптичности и почти гипоэллиптичности в терминах подмногочленов исследуемого многочлена.

Ключевые слова: гипоэллиптические, почти гипоэллиптические многочлены, сравнение многочленов.

Пусть N – множество натуральных чисел, $N_0 = N \cup \{0\}$, $N_0^n \ (n \in N)$ – множество n-мерных мультииндексов $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n)$, где $\alpha_j \in N_0$ ($j = 1, \ldots, n$), R^n – n-мерное вещественное эвклидово пространство точек $\xi = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$, а $C^n := R^n x i R^n$, $i^2 = -1$. Для $\xi \in R^n$ и $\alpha \in N_0^n$ обозначим $|\xi| = (\xi_1^2 + \ldots + \xi_n^2)^{\frac{1}{2}}$, $|\alpha| = \alpha_1 + \ldots + \alpha_n$ и $\xi^\alpha = \xi_1^{\alpha_1}, \ldots, \xi_n^{\alpha_n}$. Пусть $P(\xi) = \sum_\alpha \gamma_\alpha \xi^\alpha$ – многочлен с постоянными коэффициентами, где сумма распространяется по конечному набору мультииндексов $(P) := \{\alpha \in N_0^n, \gamma_\alpha \neq 0\}$.

Определение 1. *(см.* [1], *определение 11.1.2 и теорема 11.1.3). Многочлен* P *называется гипоэллиптическим, если для любого* $\alpha \in N_0^n$, $|\alpha| \neq 0$ *при* $|\xi| \to \infty$

$$\frac{|D^\alpha \mathrm{P}(\xi)|}{1+|\mathrm{P}(\xi)|} := \frac{\left|\frac{\partial^\alpha}{\partial \xi^\alpha}\mathrm{P}(\xi)\right|}{1+|\mathrm{P}(\xi)|} \to 0.$$

Определение 2. *(см.* [2]*) Многочлен* P *называется почти гипоэллиптическим, если с некоторой постоянной* $C>0$

$$\sum_\alpha |D^\alpha \mathrm{P}(\xi)| \le C(|\mathrm{P}(\xi)|+1), \quad \xi \in R^n.$$

Определение 3. *(см.* [3]*) Скажем, что многочлен* P *мощнее многочлена (функций)* Q *и запишем, что* $Q < \mathrm{P}$, *если с некоторой постоянной* $C>0$ $|Q(\xi)| \le C(|\mathrm{P}(\xi)|+1), \quad \xi \in R^n$.

Теорема 1. *Пусть многочлен*

$$\mathrm{P}(\xi', \xi_n) = \mathrm{P}(\xi) = \sum_{\alpha \in (\mathrm{P})} \gamma_\alpha \xi^\alpha, \; \xi' := (\xi_1, \ldots, \xi_{n-1})$$

почти гипоэллиптичен. Тогда

1) $\mathrm{P}_j < \mathrm{P}_0$, $j = 0, \ldots, m := \max\{\alpha_n, (\alpha', \alpha_n) \cup (\mathrm{P})\}$, *где*

$$\mathrm{P}_j(\xi') := \sum_{(\alpha', j') \in (\mathrm{P})} \gamma_{(\alpha', j)} (\xi')^{\alpha'}, \quad j = 0, \ldots, m;$$

2) P_0*-почти гипоэллиптичен как многочлен от* ξ'.

Доказательство. Так как, очевидно, что $\mathrm{P}_j(\xi') = \frac{1}{j!}(D_n^j \mathrm{P})(\xi', 0)$, $i = 0,1,\ldots,m$, то в силу условия теоремы с некоторой постоянной $C_1 > 0$ имеем, что $|\mathrm{P}_j(\xi')| = \frac{1}{j!}(D_n^j \mathrm{P})(\xi', 0) \le C_1(|\mathrm{P}_0(\xi', 0)|+1), \quad \xi' \in R^{n-1}$, то есть $\mathrm{P}_j < \mathrm{P}_0, \quad j = 0,1,\ldots,m$. Этим утверждение пункта 1 доказана.

Докажем утверждение пункта 2. Для любого $\alpha' \in N_0^{n-1}$ с некоторой постоянной $C_2 > 0$ в силу условия теоремы имеем, что $\left|D^{\alpha} \mathrm{P}_0(\xi')\right| = \left|\left(D^{\alpha'} \mathrm{P}\right)(\xi',0)\right| \le C_1\left(\left|\mathrm{P}(\xi',0)\right| + 1\right) = C_1\left|\mathrm{P}_0(\xi')\right| + 1, \quad \xi' \in R^{n-1}$, то есть P_0 – почти гипоэллиптичен как многочлен от ξ'. Теорема доказана.

Лемма 1. *Пусть* $\mathrm{P}(\xi')$ *и* $Q(\xi')$ $\left(\xi' \in R^{n-1}\right)$ *– многочлены с постоянными коэффициентами,* $m \in N$, $r \in N_0$ $r < m$. *Если многочлен* P *гипоэллиптичен и* $|Q|^{\frac{m}{m-r}} < \mathrm{P}$, *то при* $|\xi'| \to \infty$

$$\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q(\xi')\right| \Big/ \left[1 + \left|\mathrm{P}(\xi')\right|\right]^{\frac{m-r}{m}} \to 0.$$

*Доказательство***.** Утверждение леммы при $r = 0$ непосредственно следует из работы [4]. Докажем утверждение леммы для $1 \le r \le m-1$. Обозначим через $d_{\mathrm{P}}(\xi')$ расстояние точки $\xi' \in R^{n-1}$ от множества $\left\{\xi' \in C^{n-1}, \quad \mathrm{P}(\xi') = 0\right\}$. В силу леммы 10.4.2 работы [1] с некоторой постоянной $C_1 > 0$ имеем, что

$$\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q(\xi')\right| d_P(\xi') \le Q(\xi', d_P(\xi')) \le C_1 \sup\left|Q(\xi' + \eta')\right| \quad \xi' \in R^{n-1} \quad |\eta'| \le d_P(\xi'),$$

где для данного многочлена q и числа t, $\tilde{q}(\xi',t) = \left(\sum_{\alpha' \in N_0^n}\left|D^{\alpha'} q(\xi')\right|^2 t^{2|\alpha'|}\right)^{\frac{1}{2}}$.

Отсюда, в силу условия леммы на основании лемм 10.4.2 и 11.1.4 работы [1] с некоторыми постоянными $C_{2,} C_{3,} C_4 > 0$ имеем, что

$$\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q(\xi') d_P(\xi') \le C_2 \sup\left[\left|\mathrm{P}(\xi' + \eta')\right| + 1\right]^{\frac{m-r}{m}} \le C_3\left[\tilde{P}(\xi', d_P(\xi'))\right]^{\frac{m-r}{m}} \le$$

$$\le C_4\left(\left|\mathrm{P}(\xi')\right| + 1\right)^{\frac{m-r}{m}}, \quad \xi' \in R^{n-1}.$$

Так как, в силу условия леммы, $d_P(\xi') \to \infty$ при $|\xi'| \to \infty$ (см. [1], теорема 11.1.3), то отсюда непосредственно получаем утверждение леммы. Лемма 1 доказана.

Следствие 1. *При условии леммы 1, когда*

$$1 \le r \le m-1 \quad |Q(\xi')|/[|P(\xi')+1|] \to 0 \; при \; |\xi'| \to \infty.$$

Доказательство непосредственно следует из леммы 1, так как из условия гипоэллиптичности многочлена P имеем, что $\mathrm{P}(\xi') \to \infty$ при $|\xi'| \to \infty$.

Лемма 2. *При условиях леммы 1, когда*

$$1 \le r \le m-1 \quad \frac{|\xi_n|^r \sum_{l=1}^{n-1} |D_l Q(\xi')|}{1+|\xi_n|^m + |\mathrm{P}(\xi')|} \to 0 \;\; при \;\; |\xi| = |(\xi', \xi_n)| \to \infty.$$

Доказательство. Предположим обратное, что существуют число $C > 0$ и последовательность $\{\xi^s\}_{s=1}^{\infty} \in R^n$ $|\xi^s| \to \infty$ при $s \to \infty$ для которых

$$\frac{|\xi_n^s|^r \sum_{l=1}^{n-1} |D_l Q((\xi')^s)|}{1+|\xi_n^s|^m + |\mathrm{P}((\xi')^s)|} \ge C \quad s = 1,2,\ldots \quad . \tag{1}$$

Очевидно, за счет перехода на подпоследовательность последовательности $\{\xi^s\}_{s=1}^{\infty}$ возможны следующие случаи:

1) существует постоянная $\mathrm{M} > 0$ такая, что
$|(\xi')^s| \le \mathrm{M},\; s = 1,2,\ldots,\;\; |\xi_n^s| \to \infty$ при $s \to \infty$;

2) существует постоянная $\mathrm{M} > 0$ такая, что
$|\xi_n^s| \le \mathrm{M},\; s = 1,2,\ldots,\;\; |(\xi')^s| \to \infty$ при $s \to \infty$;

3) $|\xi_n^s| \le \mathrm{M}$ $\;|(\xi')^s| \to \infty$ при $s \to \infty$.

В случае 2) в силу следствия 1 при $s \to \infty$ имеем

$$\frac{\left|\xi_n^s\right|^r \sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\xi_n^s\right|^m+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \le \frac{\mathrm{M}^r \sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \to \infty,$$

что противоречит оценке (1).

В случае 1) с некоторой постоянной $C_1 = C_1(\mathrm{M}, Q) > 0$ при $s \to \infty$

$$\frac{\left|\xi_n^s\right|^r \sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\xi_n^s\right|^m+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \le \frac{C_1\left|\xi_n^s\right|^r}{1+\left|\xi_n^s\right|^m} \to \infty,$$

что опять противоречит оценке (1).

В случае 3) в силу леммы 1 при $s \to \infty$ имеем, что

$$U_s := \frac{\left[\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|\right]^{\frac{m}{(m-r)}}}{1+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \to 0.$$

Пусть $t_s := U_s^{\frac{m}{2(m-r)}}$, $s = 1,2,\ldots$ Тогда с применением неравенства Гелдера при $s \to \infty$ имеем, что

$$\frac{\left|\xi_n^s\right|^r \sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\xi_n^s\right|^m+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \le \frac{\frac{r}{m}\left|\xi_n^s\right|^m t_s^{\frac{m}{r}} + \frac{m-r}{m} t_s^{-\frac{m}{m-r}}\left[\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l Q\left((\xi')^s\right)\right|\right]^{\frac{m}{m-r}}}{1+\left|\xi_n^s\right|^m+\left|\mathrm{P}\left((\xi')^s\right)\right|} \le$$

$$\le \frac{r}{m} t_s^{\frac{m}{r}} + \frac{m-r}{m} U_s^{-\frac{1}{2}} U_s \to 0.$$

Полученное соотношение противоречит оценке (1) и доказывает справедливость утверждения леммы. Лемма 2 доказана.

Теорема 2. *Пусть* $\mathrm{P}(\xi) = \mathrm{P}(\xi', \xi_n) = \sum_{j=0}^{m} \xi_n^j \mathrm{P}_j(\xi')$, *где* P_0 *гипоэллиптичен как многочлен от* ξ', $\mathrm{P}_m(\xi') = 1$ *и* $\left|\mathrm{P}_j\right|^{\frac{m}{m-j}} < \mathrm{P}_0$, $j = 1,\ldots,m-1$. *Если с некоторой постоянной* $C > 0$

$$1+\left|P(\xi)\right|\geq C\sum_{j=0}^{m}\left|\xi_n^j P_j(\xi')\right|,\ \xi\in R^n, \tag{2}$$

то многочлен P *гипоэллиптичен.*

Доказательство. В силу работы $[5]$ достаточно показать, что при $|\xi|\to\infty$

$$\sum_{l=1}^{n}\left|D_l P(\xi)\right|\Big/\left[1+\left|P(\xi)\right|\right]\to 0. \tag{3}$$

Очевидно, что для доказательства соотношения (3), достаточно показать, что для любого $s,\ 0\leq s\leq m$ при $|\xi|\to\infty$

$$\sum_{l=1}^{n}\left|D_l\xi_n^j P_j(\xi')\right|\Big/\left[1+\left|P(\xi)\right|\right]\to 0. \tag{4}$$

В силу оценки (2), соотношение (4) эквивалентно следующему соотношению:

$$\sum_{l=1}^{n}\left|D_l\left(\xi_n^j P_j(\xi')\right)\right|\Big/\left[1+\sum_{i=0}^{m}\left|\xi_n^j P_j(\xi')\right|\right]\to 0,\ |\xi|\to\infty. \tag{5}$$

При $j=0,$ так как $P_m(\xi')=1$ имеем, что

$$\frac{\sum_{l=1}^{n}\left|D_l P_0(\xi')\right|}{1+\sum_{j=0}^{m}\left|\xi_n^j P_j(\xi')\right|}\leq\frac{\sum_{l=1}^{n-1}\left|D_l P_0(\xi')\right|}{1+\left|\xi_n\right|^m+\left|P_0(\xi')\right|}\to 0,$$

когда $|\xi|\to\infty.$

При $j=m,$ так как $P_m(\xi')=1$ имеем, что

$$\frac{\sum_{l=1}^{n}\left|D_l\xi_n^m P_m(\xi')\right|}{1+\sum_{j=0}^{m}\left|\xi_n^j P_j(\xi')\right|}\leq\frac{m\left|\xi_n\right|^{m-1}}{1+\left|\xi_n\right|^m+\left|P_0(\xi')\right|}\to 0,$$

когда $|\xi|\to\infty.$

Пусть $1\leq r\leq m-1,$ тогда

$$\frac{\sum_{l=1}^{n}\left|D_l\left(\xi_n^r \mathrm{P}_r(\xi')\right)\right|}{1+\sum_{j=0}^{m}\left|\xi_n^j \mathrm{P}_i(\xi')\right|} \le \frac{r|\xi_n|^{r-1}|\mathrm{P}_r(\xi')| + |\xi_n|^r \sum_{l=1}^{n-1} D_l \mathrm{P}_r(\xi')}{1+|\xi|^m + \left|\xi_n^r \mathrm{P}_r(\xi')\right| + |\mathrm{P}_0(\xi')|}.$$

Так как в силу леммы 2 при $1 \le r \le m-1$, $\dfrac{|\xi_n|^r \sum_{l=1}^{n-1}|D_l \mathrm{P}_r(\xi')|}{1+|\xi_n|^m + |\mathrm{P}_0(\xi')|} \to 0$ при $|\xi| \to \infty$, то для доказательства соотношения (5) для $1 \le r \le m-1$ достаточно показать, что $\dfrac{|\xi_n|^{r-1}|\mathrm{P}_r(\xi')|}{1+|\xi_n|^m + \left|\xi_n^r \mathrm{P}_r(\xi')\right| + |\mathrm{P}_0(\xi')|} \to 0,$ когда $|\xi| \to \infty$.

Предположим обратное, что для некоторого $r_0 : 1 \le r_0 \le m-1$ существует постоянная $C_1 > 0$ и последовательности $\{\xi^s\}_{s=1}^{\infty} \in R^n$, $|\xi^s| \to \infty$ при $|s| \to \infty$, для которых

$$\frac{|\xi_n^s|^{r-1}\left|\mathrm{P}_{r_0}\left((\xi')^s\right)\right|}{1+|\xi_n^s|^m + |\xi_n^s|^{r_0}\left|\mathrm{P}_{r_0}(\xi')^s\right| + \left|\mathrm{P}_0((\xi'))^s\right|} \ge C_1, \quad s = 1,2,\ldots \tag{7}$$

Из оценки (7) следует, что $\mathrm{P}_{r_0}\left((\xi')^s\right) \ne 0,\ s = 1,2,\ldots$. За счет перехода на подпоследовательность последовательности $\{\xi^s\}_{s=1}^{\infty}$ возможны следующие два случая

1) $|\xi_n^s| \to \infty$ при $s \to \infty$;

2) существует число $\mathrm{M} > 0$ такое, что $|\xi_n^s| < M$, $s = 1,2,\ldots$

В случае 1) имеем, что при $s \to \infty$

$$\frac{|\xi_n^s|^{r_0-1}\left|\mathrm{P}_{r_0}\left((\xi')^s\right)\right|}{1+|\xi_n^s|^m + |\xi_n^s|^{r_0}\left|\mathrm{P}_{r_0}(\xi')^s\right| + \left|\mathrm{P}_0((\xi'))^s\right|} \le \frac{1}{|\xi_n^s|} \to 0.$$

В случае 2) имеем, что $\left|(\xi')^S\right| \to \infty$ при $s \to \infty$ и следовательно, в силу следствия 1 получим

$$\frac{\left|\xi_n^s\right|^{r_0-1}\left|\mathrm{P}_{r_0}\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\xi_n^s\right|^m+\left|\xi_n^s\right|^{r_0}\left|\mathrm{P}_{r_0}(\xi')^s\right|+\left|\mathrm{P}_0((\xi'))^s\right|} \le \frac{\mathrm{M}^{r_0-1}\left|\mathrm{P}_{\Gamma_0}\left((\xi')^s\right)\right|}{1+\left|\mathrm{P}_0\left((\xi')^s\right)\right|} \to 0.$$

Полученные соотношения противоречат оценке (7) и доказывают, что при $1 \le r \le m,$ верны соотношению (6). Этим утверждение теоремы 2 доказано.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Хермандер Л.* Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными.Т. 2, М.: Мир, 1986.
2. *Kazaryan G.G.* On almost hypoelleptic polynomials. Doklady Ross. Aead. Nauk 2004, 398, m 6, 701–703.
3. *Казарян Г.Г., Маргарян В.Н.* Критерии гипоэллиптичности в терминах мощности и силы операторов // Труды МИАН СССР, 1979. Т. 150, 128–142.
4. *Маргарян В.Н., Хоршикян А.Г.* Сравнение многочленов многих переменных //«Вестник РАУ», 2016, № 2, 20–31.
5. *Казарян Г.Г., Маргарян В.Н.* Носитель гипоэллиптичности линейных дифференциальных операторов // Изв. Ан. Арм.Фрм. ССР, 1986.Т. XXII, M 5, 315–336.

HYPOELLIPTICITY AND ALMOST HYPOELLIPTICITY IN TERMS OF COMPARISON OF SUBPOLYNOMIALS

V. Margaryan

ABSTRACT

In this paper, the necessary, sufficient conditions for hypoellipticity and almost hypoellipticity are found in terms of the subpolynomialsof the polynomial under study.

Keywords: hypoelliptic, almost hypoelliptic polynomials, comparison of polynomials.

ՀԻՊՈԼԻՊՏԻԿՈՒԹՅՈՒՆԸ և ՀԱՄԱՐՅԱ ՀԻՊՈԷԼԻՊՏԻԿՈՒԹՅՈՒՆԸ ԵՆԹԱԲԱԶՄԱՆԴԱՄՆԵՐԻ ՀԱՄԵՄԱՏՈՒԹՅԱՆ ՏԵՐՄԻՆՆԵՐՈՎ

Վ.Ն. Մարգարյան

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Աշխատանքում գտնված են հիպոէլիպտիկության և համարյա հիպոէլիպտիկության անհրաժեշտ, բավարար պայմաններ հետազոտվող բազմանդամի ենթաբազմանդամի տերմիններով:

Հիմնաբառեր՝ հիպոէլիպտական, համարյա հիպոէլիպտական բազմանդամներ, բազմանդամների համեմատություն:

УДК 512.624.3

ON TWO REPRESANTATIONS OF COSETS

A. Minasyan

Yerevan State University

ashot.minasya@gmail.com

ABSTRACT

In this paper two different representations of a coset (affine subspace) over a finite field, by system of linear equations and by root polynomials are described. Algorithms to transform from one representation to another and vice versa are presented.

Keywords: linear algebra, coset, root polynomial.

1. Introduction

Let F_q be the finite field of q elements and F_q^n be the vector space of dimension n over F_q. A *coset* of subspace L in F_q^n is a translate of L, i.e. a set $v + L = \{v + x \mid x \in L\}$ for some vector v.

Any k-dimensional coset in F_q^n can be represented as set of solutions of a certain system of linear equations over F_q of rank $n - k$ and vice versa.

$$\begin{cases} \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \cdots \alpha_{1n}x_n = \beta_1 \\ \alpha_{21}x_1 + \alpha_{22}x_2 + \cdots \alpha_{2n}x_n = \beta_2 \\ \vdots \\ \alpha_{m1}x_1 + \alpha_{m2}x_2 + \cdots \alpha_{mn}x_n = \beta_m \end{cases} \tag{1}$$

If the rank of the system (1) is $n-k$ and it has at least one solution then the solution set forms a coset of dimension k. The linear subspace of the coset is the solution set of the corresponding homogeneous system $(\beta_1=\beta_2=\cdots=\beta_n=0)$

Another representation of a coset is introduced in [1, 2]. Finite field F_{q^n} can be regarded as vector space of dimension n over F_q (F_q^n). Let $\{\beta^q,\beta^{q^2},\beta^{q^3},\cdots,\beta^{q^{n-1}}\}$ be a normal basis of F_{q^n}. One can check [3] for the existence of a normal basis and an algorithm to find it. Then we have the natural $1-1$ correspondence:

$$v=(v_1,\cdots,v_n)\in F_q^n \leftrightarrow v_1\beta+v_2\beta^q+v_3\beta^{q^2}+\cdots$$
$$\cdots+v_n\beta^{q^{n-1}}\in F_{q^n} \qquad (2)$$

We use a normal basis, because algorithms described here extensively use the operation of raising q-th power of field elements. The operation of raising to the power q (and consequently any power q^m) in the normal basis is the cyclic shift of the coefficients, since

$$v^q=v_n\beta+v_1\beta^q+v_2\beta^{q^2}+\cdots+v_{n-1}\beta^{q^{n-1}}=(v_n,v_1,\cdots,v_{n-1})$$

With each coset L in F_q^n we associate a polynomial

$$p_L(x)=\prod_{a\in L}(x-a) \qquad (3)$$

which is called the root polynomial of L.

To determine the nature of root polynomials, we need to look into the automorphisms of F_{q^n} over F_q. As is well known [3], each automorphism has the form $\varphi_m: x\to x^{q^m}$, where $0\le m\le n-1$. Any linear combination, with coefficient from F_{q^n} of these n automorphisms can be written as a polynomial over F_{q^n} of degree at most q^{n-1}. Such polynomials are known as Ore polynomials. Each Ore polynomial $p(x)$ induces a linear operator on F_q^n over F_q. In fact, all linear operators on F_q^n arise this way. A simple count reveals that there are $(q^n)^n$. Ore polynomials, the same number as the number of $n\times n$ matrices over F_q

Following facts are proven in [2].

Preposition 1

The root polynomial of a k-dimensional linear subspace L of F_q^n is an Ore polynomial of degree q^n.

Preposition 2

Any non-zero term of the root polynomial of a k-dimensional coset in F_q^n has degree 0 or degree q^m, where $0 \leq m \leq k$.

If L is a subspace and $C = v + L$ is a coset, then $p_C(x) = p_L(x - v) = p_L(x) - p_L(v)$. This means that the root polynomial of a coset is Ore polynomial plus a constant term.

Bellow we describe algorithms for transformations between the above mentioned two representations of coset.

2. Constructing root polynomial from the system of equations

Let a system of equations of form (1) represent a k-dimensional coset in F_q^n. One way to find the root polynomial is to solve the system, get all q^n solutions and multiply all terms in formula (3), but this may not be practical for large cosets.

Another approach is to use the method of undetermined coefficients. Coefficients of the root polynomial are calculated using its properties.

$$p(z) = z^{q^k} + A_1 z^{q^{k-1}} + \cdots + A_k z + A_{k+1}$$

Denote $p'(z)$ the homogeneous part of the root polynomial.

$$p(z) = z^{q^k} + A_1 z^{q^{k-1}} + \cdots + A_k z$$

As noted above, it is an Ore polynomial which evaluates to 0 on elements of the subspace of the coset. Let $e_1, \cdots, e_k$ be a fundamental basis of solutions of the homogeneous system (1) and b be one of the solutions of the system. Those can be found using Gaussian elimination algorithm. $e_1, \cdots, e_k$ and b are vectors in F_q^n. We regard them as field elements using the correspondence (2). The following system of linear equations holds:

$$\begin{cases} p'(e_1) = {e_1}^{q^k} + A_1 {e_1}^{q^{k-1}} + \cdots + A_k e_1 = 0 \\ p'(e_2) = {e_2}^{q^k} + A_1 {e_2}^{q^{k-1}} + \cdots + A_k e_2 = 0 \\ \vdots \\ p'(e_k) = {e_k}^{q^k} + A_1 {e_k}^{q^{k-1}} + \cdots + A_k e_k = 0 \end{cases}$$

The system has a unique solution because it has rank k, otherwise $e_1, \cdots, e_k$ would not be basis. $A_1, \cdots, A_k$ are calculated using Gaussian elimination algorithm.

A_{k+1} is calculated using the fact

$$p(b) = b^{q^k} + A_1 b^{q^{k-1}} + \cdots + A_k b + A_{k+1}$$

3. Constructing system of equations from the root polynomial

It is given a root polynomial $p(z) = z^{q^k} + A_1 z^{q^{k-1}} + \cdots + A_k z + A_{k+1}$. The solution set of vectors of $p(z) = 0$ is a coset in F_q^n of dimension k. We find the system of equations of form (1) that represents the coset.

It is a fact that homogeneous part of root polynomial $p(z) = z^{q^k} + A_1 z^{q^{k-1}} + \cdots + A_k z$ is an Ore polynomial which is known to be a linear operator of rank $n - k$ on F_q^n. It is clear that the kernel of the operator is the linear subspace of the coset.

We use the matrix representation of the linear operator. Let $\{\beta^q, \beta^{q^2}, \beta^{q^3}, \cdots, \beta^{q^{n-1}}\}$ be the normal basis of F_{q^n}. Correspondence (2) is used to find vector representations of field elements. First we find the values of the operator on basis elements.

$$\begin{gathered} p'(\beta) = (\beta_{11}, \cdots, \beta_{1n}) \\ p'(\beta^q) = (\beta_{21}, \cdots, \beta_{2n}) \\ \vdots \\ p'\left(\beta^{q^{n-1}}\right) = (\beta_{n1}, \cdots, \beta_{nn}) \end{gathered}$$

Now the value of the operator on any vector $(x_1, \cdots, x_n)$ can be calculated in the following way: $p(x_1, \cdots, x_n) = p'\big(x_1 \beta + x_2 \beta^q + \cdots +$

$x_n\beta^{q^{n-1}}) = x_1p'(\beta) + x_2p'(\beta^q) + \cdots x_np'(\beta^{q^{n-1}})$. The matrix form of operator $p'(z)$ would be:

$$p'(x_1, \cdots, x_n) = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \cdots & \beta_{n1} \\ \beta_{12} & \cdots & \beta_{n2} \\ \vdots & & \vdots \\ \beta_{1n} & \cdots & \beta_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

If $A_{k+1} = (\gamma_1, \cdots, \gamma_n)$ then $p(x_1, \cdots, x_n) = p'(x_1, \cdots, x_n) + (\gamma_1, \cdots, \gamma_n)$.

We got the following:

$$p(x_1, \cdots, x_n) = 0 \leftrightarrow p'(x_1, \cdots, x_n) = -(\gamma_1, \cdots, \gamma_n)$$

And the system of equations forming the coset would be

$$\begin{pmatrix} \beta_{11} & \cdots & \beta_{n1} \\ \beta_{12} & \cdots & \beta_{n2} \\ \vdots & & \vdots \\ \beta_{1n} & \cdots & \beta_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_n \end{pmatrix}.$$

REFERENCE

1. *Ore O.* On a Special Class of Polynomials, Trans. Amer. Math. Soc. 35 (1993) 559–584.
2. *Jamison R.* Covering Finite Fields with Cosets of Subspaces, 25–11–1975.
3. *Lidl R., Niederriter H.* Introduction to finite fields and their applications, Cambridge University Press, (1986).

О ДВУХ ПРЕДСТАВЛЕНИЯХ СМЕЖНЫХ КЛАССОВ

А.В. Минасян

АННОТАЦИЯ

В данной статье описаны два представления смежного класса (аффинное подпространство) над конечным полем. Это система линейных уравнений и корневой многочлен. Описаны алгоритмы для трансформации одного представления в другое.

Ключевые слова: линейная алгебра, смежный класс, корневой многочлен.

ՀԱՐԱԿԻՑ ԴԱՍԵՐԻ ԵՐԿՈՒ ՆԵՐԿԱՅԱՑՈՒՄՆԵՐԻ ՄԱՍԻՆ

Ա.Վ. Մինասյան

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Այս հոդվածում նկարագրված են վերջավոր դաշտի վրա տրված հարակից դասի (աֆֆինական ենթատարածության) երկու ներկայացումներ. մեկը՝ գծային հավասարումների համակարգի միջոցով, իսկ մյուսը՝ արմատ բազմանդամի միջոցով: Նկարագրված են ալգորիթմներ մի ներկայացումից մյուսը ստանալու համար:

Հիմնաբառեր՝ գծային հանրահաշիվ, հարակից դաս, արմատ բազմանդամ:

УДК 517.968.4

ОДНОПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ СЕМЕЙСТВО НЕТРИВИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ ДЛЯ ОДНОГО КЛАССА КВАЗИЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ ТИПА ВОЛЬТЕРРА

А.Х. Хачатрян, В.М. Кахкцян

Армянский национальный аграрный университет
Национальный исследовательский технологический университет
(МИСиС, г. Москва)

aghavard59@mail.ru, varazdat1948@mail.ru

АННОТАЦИЯ

В настоящей работе исследуется один класс квазилинейных интегральных уравнений с суммарно-разностным ядром. Доказывается существование однопараметрического семейства неотрицательных нетривиальных и ограниченных решений данного уравнения. Вычисляется предел построенных решений в бесконечности и, тем самым, получается нелинейный аналог одной теоремы из работы [1]. В конце приведены частные примеры указанных уравнений.

Ключевые слова: уравнение Вольтерра, квазилинейное уравнение, ядро, предел, итерации, монотонность, сходимость.

Введение

Настоящая заметка посвящена исследованию следующего квазилинейного интегрального уравнения Вольтерра:

$$f(x)=\int_{x}^{\infty}\left(v(t-x)-v(t+x)\right)\Big(f(t)+\chi\big(t,f(t)\big)\Big)dt, x\geq 0 \qquad (1)$$

относительно искомой вещественной функции $f(x)$.

Интерес изучения таких уравнений связан с исследованием нелинейных граничных задач для псевдо-дифференциальных уравнений, возникающих в p-адической теории открыто-замкнутых струн (см. [1-2]).

В уравнении (1) ядро v удовлетворяет следующим условиям:

$$v(\tau)>0, \tau\in R^{+}, v\in L_1(R^{+})\cap L_\infty(R^{+}), v(\tau)\downarrow \text{ по } \tau \text{ на } R^{+}, \qquad (2)$$

$$\int_{0}^{\infty}v(\tau)d\tau=1, \int_{0}^{\infty}\tau^2 v(\tau)d\tau<+\infty . \qquad (3)$$

В случае $\chi(t,u)\equiv 0, t\in R^{+}, u\in R$ уравнение (1) исследовано в работе [1]. В этой работе доказано существование неотрицательного нетривиального монотонно неубывающего непрерывного и ограниченного решения.

В настоящей работе с использованием этого результата при определенных ограничениях на функцию $\chi(t,u)$ мы докажем существование однопараметрического семейства неотрицательных нетривиальных и ограниченных решений. Более того, докажем существование предела в бесконечности для каждого решения из этого семейства.

В конце работы будут приведены примеры функций $\chi(t,u)$.

1. Формулировка основного результата

Относительно функции $\chi(t,u)$ предположим выполнение следующих условий:

I. $\chi(t,u)$ удовлетворяет условию Каратеодори на множестве $R^{+}\times R^{+}$по аргументу u, т.е. при каждом фиксированном $u\in R^{+}$ функция

$\chi(t,u)$ измерима по $t, t \in R^+$и для почти всех $t \in R^+$ непрерывна по u на R^+,

II. $\chi(t,u) \geq 0\,, (t,u) \in R^+ \times R^+$, существует $\sup\limits_{u\geq 0} \chi(t,u) \equiv \varepsilon(t)$,

где$\varepsilon \in L_1(R^+) \cap L_\infty(R^+), \varepsilon(t) \to 0$, при $t \to +\infty$ и

$$\int_0^\infty t\varepsilon(t)dt < +\infty,$$

III. $\chi(t,u)\ \uparrow$ по u на R^+.

Основным результатом настоящей работы является следующая

Теорема: Пусть ядерная функция $v(t)$ удовлетворяет условиям (2) и (3). Тогда, при условиях I)–III) уравнение (1) обладает однопараметрическим семейством неотрицательных нетривиальных и ограниченных решений $\{f_\gamma(x)\}_{\gamma>0}$, причем для любого $\gamma > 0$ существует

$$\lim_{x\to+\infty} f_\gamma(x) = \gamma. \tag{4}$$

Более того, если $\gamma_1, \gamma_2 > 0$ и $\gamma_1 > \gamma_2$, то

$$f_{\gamma_1}(x) > f_{\gamma_2}(x), x > 0 \tag{5}$$

и для любого $\gamma > 0$

$$f_\gamma(0) = 0\,. \tag{6}$$

2. Доказательство основного результата. Примеры функций $\chi(t,u)$.

Наряду с уравнением (1) рассмотрим следующее однородное уравнение типа Вольтерра:

$$\psi(x) = \int_x^\infty \big(v(t-x) - v(t+x)\big)\psi(t)dt, x \in R^+ \tag{7}$$

относительно искомой функции $\psi(x)$, где ядро v удовлетворяет условиям (2) и (3).

Из результатов работы [1] следует, что однородное уравнение (7) обладает неотрицательным нетривиальным монотонно неубывающим непрерывным и ограниченным на R^+ решением $\psi(x)$, причем

$$\psi(0) = 0, \psi(x) > 0, \text{при } x > 0, \lim_{x \to +\infty} \psi(x) = 1\,. \qquad (8)$$

Теперь рассмотрим следующее неоднородное линейное интегральное уравнение Вольтерра:

$$\Phi(x) = g(x) + \int_x^{\infty} v(t - x)\Phi(t)dt, x \in R^+ \qquad (9)$$

относительно искомой функции $\Phi(x)$, где свободный член $g(x)$ имеет следующую структуру:

$$g(x) = \int_x^{\infty} v(t - x)\varepsilon(t)dt, x \in R^+ \qquad (10)$$

(о функции $\varepsilon(t)$ см. в условии II).

Из свойств функции v и ε с учетом теоремы Фубини (см [3]) следует, что

$$g \in L_1(R^+) \cap L_\infty(R^+),\ m_1(g) \equiv \int_0^{\infty} xg(x)dx < +\infty. \qquad (11)$$

С другой стороны, т.к. $\varepsilon(t) \to 0$ при $t \to +\infty$, то из (10) следует, что

$$\lim_{x \to +\infty} g(x) = 0\,. \qquad (12)$$

Таким образом, в силу (11) из результатов работы [4] следует, что неоднородное уравнение (9) имеет неотрицательное суммируемое решение $\Phi(x)$. Заметим, что это решение обладает также следующими свойствами:

$$\Phi \in L_\infty(R^+) \text{и } \lim_{x \to +\infty} \Phi(x) = 0\,. \qquad (13)$$

Действительно, из (9) в силу (2), (11) и (12), имеем

$$0 \le \Phi(x) \le \sup_{x \ge 0} g(x) + \sup_{x \ge 0} v(x) \cdot \int_x^{\infty} \Phi(t)dt < +\infty\,,$$

$$0 \leq \Phi(x) \leq g(x) + \sup_{\tau \geq 0} v(\tau) \cdot \int_0^\infty \Phi(t)dt \to 0 \text{, при } x \to +\infty ,$$

откуда немедленно следует (13).

Теперь для уравнения (1) рассмотрим следующие последовательные приближения:

$$f_{n+1}^\gamma(x) = \int_x^\infty \big(v(t-x) - v(t+x)\big)\Big(f_n^\gamma(t) + \chi\Big(t, f_n^\gamma(t)\Big)\Big)dt,$$

$$f_0^\gamma(x) = \gamma\psi(x), n = 0,1,2,\dots, x \in R^+, \tag{14}$$

где γ – произвольное положительное число, а $\psi(x)$ – нетривиальное неотрицательное решение уравнения (7), обладающее свойсвтами (8).

В силу неравенства $v(t-x) \geq v(t+x)$, $(t,x) \in R^+ \times R^+$ и неотрицательности $\chi(t,u)$ (см. условие II) индукцией по n нетрудно доказать, что для любого $\gamma > 0$

$$f_n^\gamma(x) \uparrow \text{ по } n\,. \tag{15}$$

Ниже докажем, что

$$f_n^\gamma(x) \leq \gamma\psi(x) + \Phi(x), n = 0,1,2,\dots, x \in R^+, \gamma > 0 \tag{16}$$

Действительно, при $n = 0$ неравенство (16) сразу следует из неотрицательности функции $\Phi(x)$. Предположим, что (16) выполняется при некотором натуральном n. Тогда, учитывая условия II), III), формулы (9), (10), из (14) в силу индукционного предположения будем иметь:

$$f_{n+1}^\gamma(x) \leq \int_x^\infty (v(t-x) - v(t+x))(\gamma\psi(t) + \Phi(t) + \chi(t, \gamma\psi(t) + \Phi(t)))dt \leq$$

$$\leq \gamma \int_x^\infty \big(v(t-x) - v(t+x)\big)\psi(t)dt + \int_x^\infty v(t-x)\Phi(t)dt +$$

$$+\int_x^\infty \big(v(t-x)-v(t+x)\big)\chi\big(t,\gamma\psi(t)+\Phi(t)\big)dt \le \gamma\psi(x)+$$

$$+\int_x^\infty v(t-x)\Phi(t)dt+\int_x^\infty v(t-x)\chi\big(t,\gamma\psi(t)+\Phi(t)\big)dt \le$$

$$\le \gamma\psi(x)+\int_x^\infty v(t-x)\Phi(t)dt+\int_x^\infty v(t-x)\varepsilon(t)dt=\gamma\psi(x)+\Phi(x).$$

Индукцией по n легко можно проверить, что каждый член последовательности функций $\{f_n^\gamma(x)\}_{n=0}$ является измеримой функцией по x на R^+. Это следует из условий I), (2) и (3).

Из монотонности и неотрицательности функции $\chi(t,u)$ следует также, что если $\gamma_1,\gamma_2>0$ и $\gamma_1>\gamma_2$, то

$$f_n^{\gamma_1}(x)-f_n^{\gamma_2}(x)\ge(\gamma_1-\gamma_2)\psi(x), n=0,1,2,\dots,x\in R^+. \qquad (17)$$

Таким образом, из перечисленных свойств следует поточечная сходимость последовательности функций $\{f_n^\gamma(x)\}_{n=0}^\infty$ при $n\to\infty$: $\lim\limits_{n\to\infty} f_n^\gamma(x)=f^\gamma(x)$, причем $f^\gamma(x)$, согласно предельной теореме Б. Леви, удовлетворяет уравнению (1).

Из (15) и (16) следует, что

$$\gamma\psi(x)\le f^\gamma(x)\le\gamma\psi(x)+\Phi(x), x\in R^+, \gamma>0 \qquad (18)$$

В неравенстве (17) устремляя $n\to\infty$, получим

$$f^{\gamma_1}(x)-f^{\gamma_2}(x)\ge(\gamma_1-\gamma_2)\psi(x), x\in R^+. \qquad (19)$$

Учитывая (8) из (19), приходим к (5) и (6). Так как $\lim\limits_{x\to+\infty}\psi(x)=1$, $\lim\limits_{x\to+\infty}\Phi(x)=0$,то из (18) следует, что

$$\lim_{x\to+\infty} f^\gamma(x)=\gamma.$$

Таким образом, теорема полностью доказана.

В конце работы приведем несколько примеров функции $\chi(t,u)$, для которых выполняются условия I) –III):

A. $\chi(t,u) = e^{-t} \cdot \frac{\alpha u}{u+1}$, $\alpha > 0, (t,u) \in R^{+} \times R^{+}$,

B. $\chi(t,u) = ce^{-t^2}(1 - e^{-u})$, $c > 0, (t,u) \in R^{+} \times R^{+}$,

C. $\chi(t,u) = \frac{q}{1+t^3}\sqrt{\frac{u(1-e^{-u})}{u+1}}$, $q > 0, (t,u) \in R^{+} \times R^{+}$.

Авторы выражают глубокую благодарность Х.А. Хачатряну за обсуждения и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Хачатрян Х.А.* О разрешимости некоторых классов нелинейных интегральных уравнений в теории p-адической струны. Изд-во РАН, сер. Мат. Т. 82, № 2, 2018.
2. *Владимиров В.С., Волович Я.И.* О нелинейном уравнении динамики в теории p-адической струны. ТМФ. Т. 138, № 3. СС. 355–368, 2004.
3. *Колмогоров А.Н., Фомин В.С.* Элементы теории функций и функционального анализа. М. Изд-во «Наука», 1981, 544 с.
4. *Арабаджян Л.Г., Енгибарян Н.Б.* Уравнения в свертках и нелинейные функциональные уравнения. Итоги Науки и Техники, Мат. Анализ. Т. 22. СС. 175–242, 1984.

ONE PARAMETRIC FAMILY OF NONTRIVIAL SOLUTIONS FOR ONE CLASS OF VOLTERYAN TYPE QUASILINEAR EQUATIONS

A. Khachatryan, V. Makhtsyan

ABSTRACT

In the present note the one class of quasilinear integral equations with sum-difference kernel is investigated. For these equations the existence of one parametric family of nonnegative nontrivial and bounded solutions is

one parametric family of nonnegative nontrivial and bounded solutions is proved. The limit at infinity for obtaned solutions is calculated, which is the nonlinear analogue of one theorem of the work [1]. At the end of the work for above mentioned equations the list of particular examples are given.

Keywords: Volteryan equation, quasilinear equation, kernel, limit, iteration, monotony, convergence.

ՎՈԼՏԵՐԱՅԻ ՏԻՊԻ ՔՎԱԶԻԳԾԱՅԻՆ ՀԱՎԱՍԱՐՈՒՄՆԵՐԻ ՄԻ ԴԱՍԻ ՀԱՄԱՐ ՈՉ ՏՐԻՎԻԱԼ ԼՈՒԾՈՒՄՆԵՐԻ ՄԵԿ ՊԱՐԱՄԵՏՐԱՆՈՑ ԸՆՏԱՆԻՔ

Ա.Խ. Խաչատրյան, Վ.Մ. Քաղքցյան

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Ներկայացված աշխատանքում ուսումնասիրվում է գումարա-տարբե-րակային կորիզով քվազիգծային ինտեգրալ հավասարումների մի դաս: Նշված հավասարումների համար ապացուցվում է ոչ տրիվիալ, սահմանա-փակ և ոչ բացասական լուծումների մեկ պարամետրանոց ընտանիքի գոյու-թյունը: Ստացվել է նաև կառուցված լուծումների սահմանը անվերջությունում և դրանով իսկ ստացվել [1] աշխատանքի մի թեորեմի ոչ գծային հանգույնը: Վերջում բերվում են նշված հավասարումների մասնավոր օրինակներ:

Հիմնաբառեր՝ Վոլտերայի հավասարում, քվազիգծային հավասա-րումներ, կորիզ, սահման, իտերացիա, մոնոտոնություն, զուգամիտություն:

ФИЗИКА

УДК 541.64

ПЕРЕХОД ПОРЯДОК-БЕСПОРЯДОК В ГЕТЕРОГЕННЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ МАКРОМОЛЕКУЛАХ

А.В. Асатрян, А.К. Андриасян, Ш.А. Тоноян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов

Ереванский государственный университет

sh.tonoyan@.ysu.am

АННОТАЦИЯ

Рассматривается теория перехода спираль-клубок в гетерогенных биополимерах (полипептидах и полинуклеотидах). Теория основана на Обобщенной Модели Полипептидной Цепи (ОМПЦ) с применением метода отжига с ограничениями (constrained annealing). Получено выражение для свободной энергии гетерополимера через соответствующим образом усредненную трансфер-матрицу гомополимерной модели. На этой основе получены выражения для параметра порядка. Получен алгоритм построения кривых плавления (включая и дифференциальные кривые плавления) гетерогенных биополимеров. Показано уширение интервала перехода по отношению к гомополимерному.

Ключевые слова: переход спираль-клубок, гетерополимер, бимодальная гетерогенность, ОМПЦ, метод отжига с ограничениями.

1. Введение

Явление перехода спираль-клубок как переход порядок-беспорядок в биополимерах интенсивно исследовалось, начиная с 1960-х годов [1–7] и до сих пор является предметом пристального внимания [8–15]. Чаще всего переход спираль-клубок моделируется в приближении двух состояний на основе различных модификаций модели Зимма–Брегга, в основе которых, в свою очередь, лежит модель Изинга [16–19]. Альтернативный подход состоит в расчете свободной энергии одномерного раствора стыков между спиральными и клубкообразными участками [6]. Эти теории являются среднеполевыми в том смысле, что гамильтониан модели содержит параметры, уже усредненные по конформациям макромолекулы и растворителя. Так, например, параметр кооперативности вводится как статистический вес стыка между клубкообразными и спиральными участками [6]. Однако, различными авторами представлялись некоторые теоретические модели как для полипептидов [20–22], так и для полинуклеотидов [9–13], без использования приближения среднего поля. Более того, некоторые модели применялись для описания плавления гетерополимеров и на их основе получен ряд важных результатов [1–19]. Однако некоторые проблемы остаются неизученными. В частности, описание плавления гетерополимера не рассматривалось с микроскопической точки зрения.

В предыдущих наших публикациях [23–27] была представлена микроскопическая модель, описывающая переход спираль-клубок, в основу которой положена модификация модели Поттса с многочастичным взаимодействием. Данная модель названа обобщенной моделью полипептидной цепи (ОМПЦ). В рамках этой модели для гомополимеров получен ряд принципиальных результатов. На основе ОМПЦ с применением микроканонического метода нами был получен ряд интересных результатов для гетерополимерного случая [28]. В данной работе метод отжига с ограничениями развит для аналитического описания

кривых перехода в биополимерах с двумя типами повторяющихся единиц. Для описания гомополимерной задачи, используется уже многократно применявшаяся модель ОМПЦ [23–27, 33–34] в том числе и для гетерополимерного случая [28]. Далее нами была рассмотрена проблема перехода спираль-клубок с гетерогенностью по энергии образования пар оснований [33] и гетерогенностью по числу конформаций [34] с использованием метода отжига с ограничениями (constrained annealing) [29].

2. Метод отжига с ограничениями

Для исследования перехода спираль-клубок с гетерогенностью по энергиям нами был использован подход, разработанный M. Serva и G. Paladin в [25]. Следуя [25], свободная энергия системы с замороженной случайной последовательностью повторяющихся единиц оценена на основании отожженного среднего статистической суммы с соответствующими ограничениями. Данный подход является вариационным и может быть реализован с использованием неопределенных множителей Лагранжа. Согласно [25], свободная энергия может быть оценена как

$$f \geq g(T, \mu) \geq f_A \qquad (2.1)$$

где f и f_A – замороженная и отожженная свободная энергии из расчета на нуклеотид, соответственно:

$$g(T, \mu) = -\frac{1}{N} k_B T \ln \langle Z(seq) \exp^{-N\mu a(seq)} \rangle_{av} \qquad (2.2)$$

Здесь *Z(seq)* – статистическая сумма биополимера с замороженной реализацией последовательности seq, а *α(seq)* – соответствующая самоусредняемая замороженная величина. Здесь $\langle \ldots \rangle_{av}$ означает среднее по функции распределения для последовательности. В дальнейшем данный подход будем называть методом «отжига с ограничениями».

3. Вычисление свободной энергии

Рассмотрим гетерополимер, состоящий из повторяющихся единиц двух сортов, например, для ДНК – GC-и AT-пар. При этом, предполагается, что сорта повторяющихся единиц выбираются статистически независимо. Свободная энергия такой системы выражается в виде

$$F = -k_B T \langle \ln Sp \prod_{i=1}^{N} G_i \rangle \tag{3.1}$$

Здесь G_i – трансфер-матрица

$$G_i = \begin{pmatrix} e^{J_i} & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & e^{K_i} \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & e^{K_i} \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

где, U_i – энергия образования водородной связи i-й компоненты гетерополимера, $K_i = lnQ_i$ и Q_i – число состояний i-й компоненты [10–14].

Причем $G_i = G_A$ с вероятностью x и $G_i = G_B$ с вероятностью $1-x$.

Введем спиновую переменную $\sigma = \pm 1$ таким образом, что

$$G(\sigma_i = 1) = G_A, G(\sigma_i = -1) = G_B \tag{3.3}$$

При этом, $<\sigma_i>_{av} = 2x-1$, где x – доля повторяющихся единиц типа A. Таким образом, первичная структура будет выражена последовательностями чисел ± 1. Тогда

$$J_i = J_0 + \sigma_i \Delta J, K_i = K_0 + \sigma_i \Delta K, \tag{3.4}$$

где $J_0 = \frac{J_A + J_B}{2}, \Delta J = \frac{J_A - J_B}{2}, K_0 = \frac{K_A + K_B}{2}, \Delta K = \frac{K_A - K_B}{2}$. Тогда, согласно работе [29] и формуле (3.1)

$$F = -k_B T \ln Sp\langle x\exp^{-\alpha A\nu} G_A + (1-x)\exp^{\alpha B\mu} G_B\rangle^N, \qquad (3.5)$$

где μ – вариационный параметр, а α – определят ограничение, которое выбирается простейшим способом: $\alpha(\sigma) = \sum_i (\sigma_i - \langle\sigma_i\rangle)$. Отсюда, после несложных преобразований [30] в термодинамическом пределе, имеем:

$$g(\mu) = \frac{-F(\mu)}{Nk_B T} = \mu\langle\sigma_i\rangle + \ln(x\exp^{-\mu} + (1-x)\exp^{\mu}) +$$
$$+\ln\lambda_i(\exp^J, \exp^K) \qquad (3.6)$$

где λ_1 – максимальное собственное число трансфер-матрицы $G(e^J, e^K)$, а

$$\exp^J = \frac{\langle\exp^{(1+\mu)J_i}\rangle}{\langle\exp^{\mu J_i}\rangle} = \exp^{J_0}\frac{x\exp^{-\mu+\Delta J} + (1-x)\exp^{\mu-\Delta J}}{x\exp^{\Delta J} + (1-x)\exp^{-\Delta J}}$$
$$\exp^K = \exp^{K_0}\frac{x\exp^{-\mu+K} + (1-x)\exp^{\mu-K}}{x\exp^{-\mu} + (1-x)\exp^{\mu}} \qquad (3.7)$$

Поскольку выражение (2.1) дает нижнюю оценку свободной энергии цепи с замороженной последовательностью, нам необходимо найти максимум свободной энергии F(μ) или минимум приведенной свободной энергии (3.6) по параметру μ. Поэтому значение вариационного параметра определяется соотношением

$$\frac{\partial g}{\partial \mu} = 0 \qquad (3.8)$$

Для этого мы строим зависимость $g(T,\mu)$ от μ при фиксированной температуре и находим значение μ, соответствующее минимуму приведенной свободной энергии. Перебрав все значения температуры в окрестности перехода спираль-клубок, у нас будут все соответствующие значения параметра μ, что позволит, согласно выражению (3.7), получить усредненное значение параметров трансфер матрицы (3.2), после чего вычислить приведенную свободную энергию (3.6). Таким образом, для каждой температуры мы будем иметь соответствующее значение свободной энергии.

4. Степень спиральности

Из определения степени спиральности θ, как параметра порядка, следует [23, 24, 30]

$$\theta = \frac{\partial g(\mu)}{\partial J_0} = \frac{\partial \ln\lambda_1}{\partial J_0} \quad (4.1)$$

Для получения температурного поведения степени спиральности можно воспользоваться численным дифференцированием выражения главного собственного числа λ_1 по обратной температуре, однако можно воспользоваться унитарным преобразованием трансфер матрицы и получить аналитическое выражение для степени спиральности θ, что в рамках ОМПЦ для гетерополимера [2, 3, 24] определяется аналогично гомополимеру соотношением

$$\theta = \frac{(U\tilde{G}'V)_{11}}{\lambda_1}. \quad (4.2)$$

Здесь U и V – левые и правые собственные векторы матрицы $\tilde{G}$ с переопределенными согласно (3.7) параметрами e^J и e^K. Матрица $\tilde{G}'$ определяется как матрица $\tilde{G}$ с элементами равными нулю, кроме элемента 1,1: $\tilde{G}'_{ij} = \tilde{G}_{ij}\delta(i,1)\delta(j,1)$. λ_1 – максимальное собственное число для матрицы $\tilde{G}$. Итак, для гетерополимера каждому значению температуры соответствует параметр μ, затем вычисляется θ. Таким образом, на основе приближения отжига с ограничениями в общем виде получен алгоритм вычисления кривых плавления двухкомпонентного случайного гетерополимера с различными соотношениями между компонентами. Алгоритм позволяет предсказывать точку и интервал плавления такой системы, как ДНК с различным GC-составом. Следует отметить, что данный подход может быть применен и к большему числу компонент.

5. Результаты и обсуждения

На рис. 1 изображена кривая перехода спираль-клубок в гомополимере из повторяющихся единиц типа *A(1)* и кривая для гомополимера из повторяющихся единиц типа *B (2)*, а также кривая для случайного гетерополимера (*AB*) (3).

Из кривых плавления видно, что интервал перехода для гетерополимера значительно больше, чем гомополимера. Более того, расчет показывает, что интервал плавления гетерополимера остается достаточно большим даже при пренебрежении интервалом плавления гомополимера [30].

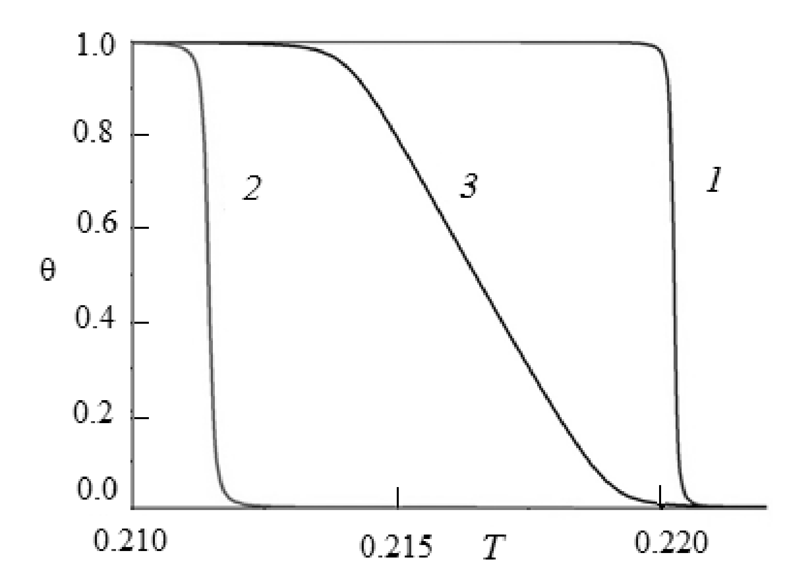


Рис. 1. Кривые зависимости степени спиральности $\theta(T)$ от температуры T при следующих параметрах теории: Q_A=71, Q_B=51, U_A=1, U_B=0.8, *x*=0.4 и Δ=4: 1 – кривая плавления для гомополимера *B,* 2 – кривая плавления для гомополимера *A,* 3 – кривая плавления для гетерополимера, состоящего из мономеров *A* и *B*.

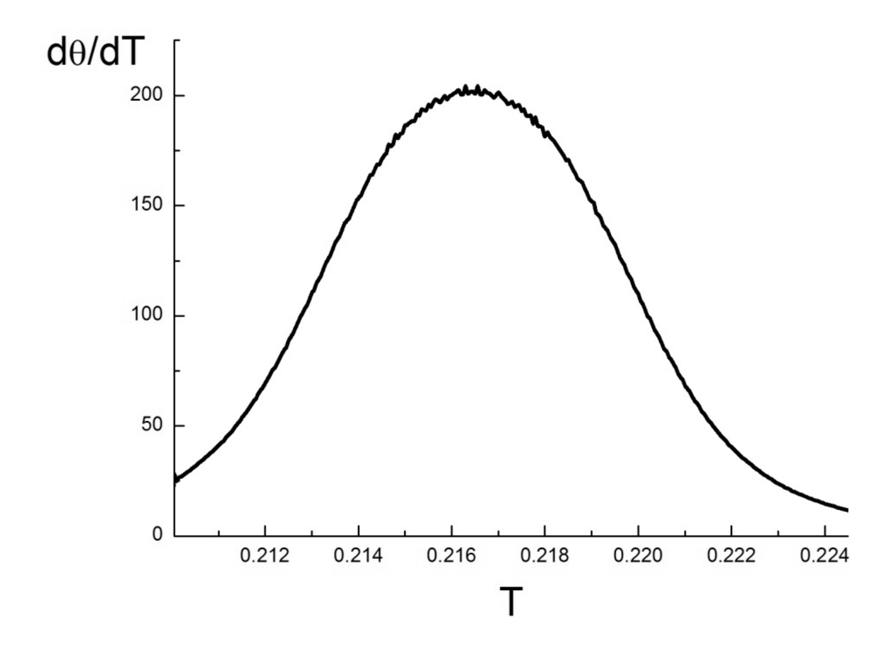


Рис. 2. Кривые зависимости ДКП дифференциальной кривой плавления $\frac{\partial\theta}{\partial T}$ от температуры T при следующих параметрах теории Q_A=71, Q_B=51, U_A=1, U_B=0.8, x=0.4 и Δ=4: 1 – кривая плавления для гомополимера B 2 – кривая плавления для гомополимера A, 3 – кривая плавления для гетерополимера, состоящего из мономеров A и B.

Для большей наглядности мы построили дифференциальную кривую плавления при тех же параметрах (рис. 2) путем численного дифференцирования кривой 1. Мы также провели анализ кривых плавления для случая гетерогенности с числом компонентов больших, чем 2, однако качественно кривые плавления не сильно отличаются от бинарного случая. Во всех случаях кривая плавления гетерополимера лежит между кривой с максимальной и минимальной температурами плавления соответствующих гомополимеров [30]. Расчеты дифференциальных кривых плавления показали, что эти кривые могут иметь один или максимум два пика при любом значении числа компонент n поэтому

случай n=2 качественно отражает плавление гетерополимера (рис. 2). Отличие дифференциальных кривых плавления заключается только в том, что при большем числе компонентов два пика проявляется более резко (рис. 3). Для качественного исследования поведения гетерополимера (определение точки и интервала плавления), поэтому n=2 для наших рассуждений достаточен.

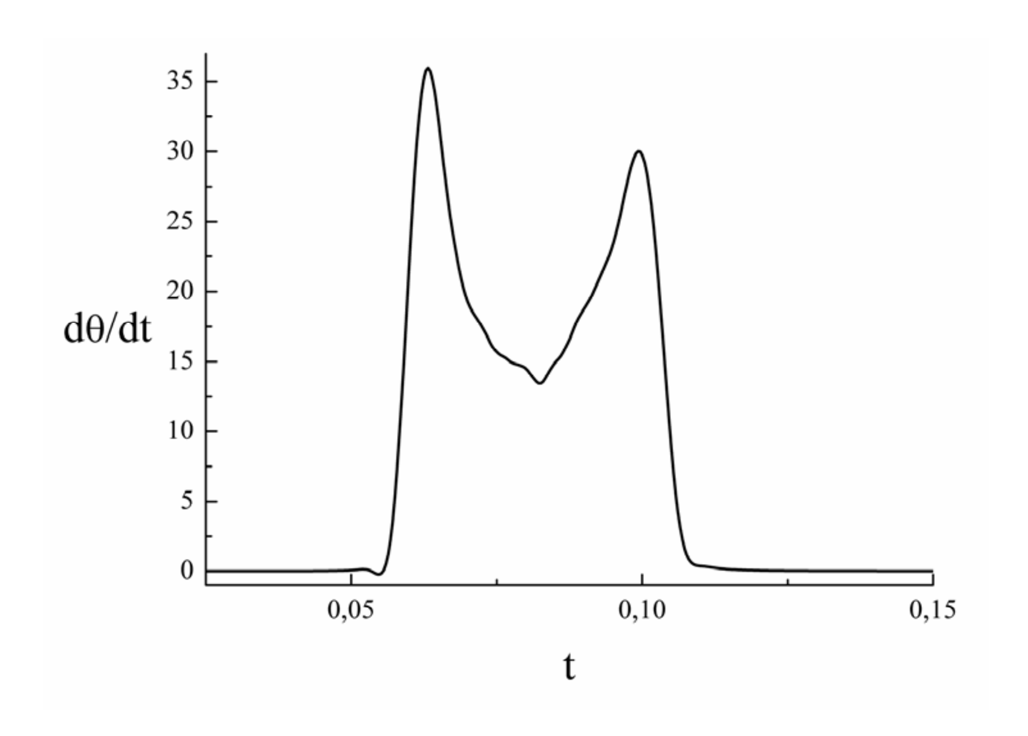


Рис. 3. Кривая зависимости ДКП дифференциальной кривой плавления трехкомпонентного гетерополимера $\frac{\partial\theta}{\partial T}$ от температуры T при следующих параметрах теории: $x_A=0.4$, $x_B=0.2$, $x_C=1-0.4-0.2=0.4$, $U_A=0.53$, $U_B=0.2$, $U_C=0.3$, $Q_A=71$, $Q_B=51$, $Q_C=61$.

Итак, поскольку бимодальная гетерогенность в рамках нашего подхода выявляет все качественные закономерности кривых плавления, мы в дальнейшем будем останавливаться на этом простом случае.

Далее, мы получили кривые плавления для бимодально гетерогенных биополимеров, гетерогенность которых обусловлена либо только различием энергий водородного связывания, либо гетерогенностью по числу конформаций. Если параметры энергий J и числа конформаций Q были выбраны таким образом, чтобы при обоих типах гетерогенности гомополимерные температурные кривые были бы идентичны для этих двух типов гетерогенности. Показано, что общие свойства кривых плавления совпадают, в обоих случаях интервал плавления примерно одинаков. Дальнейшие исследования предполагают изучения свойств плавления гетерополимеров на основе данного подхода с учетом взаимодействия с растворителем, как это нами было сделано для гомополимерного случая.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Poland D., Scheraga H.* The Theory of Helix–Coil Transition. Academic, New York, 1970.
2. *Grosberg Yu., Khokhlov A*. Statistical Physics of Macromolecules, AIP, New York, 1994.
3. *Cantor R., Shimmel T.* Biophysical Chemistry. Freeman, San Francisco, 1980.
4. *Flory P.* Statistical Mechanics of Chain Molecules. Interscience, New York, 1969.
5. *Wartell R., Benight A*. Thermal denaturation of DNA molecules: A comparision of theory with experiment. Phys. Rep., 126, 67 (1985).
6. *Vedenov A., Dykhne A., Frank-Kamenetskii M.* The helix-coil transition in DNA. Usp. Fiz. Nauk (Russian), 105, 479 (1971).

7. *Wada A., Suyama A.* Local stability of DNA and RNA secondary structure and its relation to biological functions. Prog. Biophys. Mol. Biol., 47, 113 (1986).
8. *Chalikian T.* Hydrophobic tendencies of polar groups as a major force in molecular recognition. Biopolymers, 70, 492 (2003).
9. *Garel T., Monthus C., Orland H.* A symple model for DNA denaturation. Europhys. Lett., 55, 132 (2001).
10. *Cule D., Hwa T.* Denaturation of heterogenious DNA. Phys. Rev. Lett., 79, 2375 (1997).
11. *Baiesi M., Carlon E., Orlandini E., Stella A.* The helix-coil transition in heterogenious double stranded DNA: Microcanonical method. E-print cond-mat/ 0207122.
12. *Peyrard M.* Nonlinear dynamics and statistical physics of DNA. Nonlinearity, 17, R1 (2004).
13. *Barbi M., Lepri S., Peyrard M., Theodorakopoulos N.* Thermal denaturation of a helicoidal DNA model. Phys. Rev. E, 68, 061909 (2003).
14. *Takano M., Nagayama K., Suyama A.* Investigating a link between all-atom model simulation and the Ising-based theory on the helix-coil transition: Equilibrium statistical mechanics. J. Chem. Phys., 116, 2219 (2001).
15. *Munoz V., Serrano L.* Development of the multiple sequence approximation within the AGADIR model of α-helix formation: Compaision with Zimm- Bragg and Lifsog-Roig formalisms. Biopolymers, 41, 495 (1997).
16. *Zimm B., Doty P. and Iso K.* Determination of the parameters for helix formation in poly-γ-benzyl-L-Glutamate. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 45, 1601 (1959).
17. *Zimm B., Bragg J.* Theory of the phase transition between helix and random coil in polypeptide chains. J. Chem. Phys., 31, 526 (1959).

18. *Zimm B., Chem J.* Theory of “Melting” of the helical form in double chains of the DNA type. Phys., 33, 1349 (1960).
19. *Zimm B., Rice N.* The helix-coil transition in charged macromolecules. Mol. Phys., 3, 391 (1960).
20. *Lifson S., Roig A.* On the theory of helix-coil transition in polypeptydes. J. Chem. Phys., 34, 1963 (1961).
21. *Lifson S., Zimm B.* Biopolymers, Simplified theory of helix-coil transition in DNA based on a grand partition function. 1, 15 (1963).
22. *Lifson S., Allegra J.* On the theory of order-disorder transition and copolymer structure of DNA. Biopolymers, 2, 65 (1964).
23. *Morozov V., Mamasakhlisov E., Hayryan Sh., Hu C.* Microscopical approach to the helix-coil transition in DNA. Physica A, 281, 51 (2000).
24. *Morozov V., Badasyan A., Grigoryan A., Sahakyan M., Mamasakhlisov E.* Stacking and hydrogen bonding: DNA cooperativity at melting. Biopolymers, 75, 434 (2004).
25. *Царукян А.В., Тоноян Ш.А., Бадасян А.В., Григорян А.В., Мамасахлисов Е.Ш., Морозов В.Ф.* Параметры порядка перехода спираль-клубок в биополимерах. Изд-во НАН Армении, Физика, 41, 63 (2006).
26. *Тоноян Ш.А., Бурякина Т.Ю., Царукян А.В., Мамасахлисов Е.Ш., Морозов В.Ф.* Изд-во НАН Армении, Физика, 42, 466 (2007).
27. *Тоноян Ш.А., Мирзаханян А.С., Айрапетян Г.Н., Царукян А.В., Морозов В.Ф.* Обобщенная модель полипептидной цепи для перехода спираль-клубок в двухкомпонентном расворителе. Изд-во НАН Армении, Физика, 45,133 (2010).
28. *Badasyan A., Grigoryan A., Mamasakhlisov E., Benighta A., and Morozov V.* The helix-coil transition in heterogenious double-stranded DNA: Microcanonical method. J. Chem. Phys., 123, 194701 (2005).
29. *Serva M., Paladin G.* Gibbs thermodynamic potentials for disordered systems. Phys. Rev. Lett., 70, 105 (1993).

30. *Тоноян Ш.А., Мирзаханян А.С., Мамасахлисов Е.Ш., Морозов В.Ф.* К теории перехода спираль-клубок в гетерогенных биополимерах. Метод отжига с огранчениями. Изд-во НАН Армении, Физика, 48, 350 (2013).

HELIX-COIL TRANSITION IN HETEROGENEOUS BIOLOGICAL MACROMOLECULES

Asatryan A., Andriasyan A., Tonoyan Sh., Mamasakhlisov Y., Morozov V.

ABSTRACT

Theory of helix-coil transition is considered in heterogen biopolymers (polypeptides and polynucleotides). This theory is based on Generalized Model of Polypeptide Chain (GMPC) with the application of constrained annealing method. The formula of heteropolymer's free energy is obtained through transfer-matrix of homopolimeric model averaged by corresponding way. On that bases formulas are reached for order parameter. Algorithm of melting curves has been gained (including differential melting curves) for biopolymers. Broadening of transition interval has been shown with comparision to homopolymeric one.

ՀԵՏԵՐՈԳԵՆ ԿԵՆՍԱԲԱՆԱԿԱՆ ՄԱԿՐՈՄՈԼԵԿՈՒԼՆԵՐՈՒՄ ՊԱՐՈՒՅՐ–ԿԾԻԿ ԱՆՑՈՒՄԸ

Ա.Վ. Ասատրյան, Ա.Կ. Անդրիասյան, Շ.Ա. Տոնոյան, Ե.Շ. Մամասախլիսով, Վ.Ֆ. Մորոզով

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Հետերոգեն կենսապոլիմերներում (պոլիպեպտիդներ և պոլինուկլեոտիդներ) դիտարկվել է պարույր-կծիկ անցման տեսությունը: Տեսությունը

հիմնված է պոլիպեպտիդային շղթայի ընդհանրացված մոդելի (ՊՇԸՄ) սահմանափակումներով թրձման մեթոդի կիրառմամբ: հետերոպոլիմերի ազատ էներգիայի արտահայտությունը ստացվել է, համապատասխան կեր-պով միջինացված, հոմոպոլիմերիկ մոդելի տրանսֆեր-մատրիցայի միջոցով: Դրա հիման վրա ստացվել են կարգի պարամետրի արտահայտությունները: Կեվսապոլիմերների համար ստացվել է հալման կորերի (ներառյալ դիֆերեն-ցիալ հալման կորերը) կառուցման ալգորիթմը: Համեմատած հոմոպոլիմերիկ կորի հետ՝ ցույց է տրվել հալման ինտերվալի լայնացում:

УДК 621.315

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ НА НАПРЯЖЕНИЕ ХОЛОСТОГО ХОДА НАНОПРОВОЛОКИ ИЗ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ

В.А. Хачатрян

Российско-Армянский университет

vars.khachatryan1990@gmail.com

АННОТАЦИЯ

В работе представлена аналитическая модель нанопроволоки (НП) из GaAs с радиальным p-n-переходом, имеющим структуру типа ядро-оболочка. Данная модель позволяет изучить влияние поверхностной рекомбинации на фотоэлектрические характеристики солнечного элемента (СЭ) на основе НП. Результаты показывают, что малое напряжение холостого хода, часто наблюдаемое для подобных солнечных элементах, частично вызвано явлением поверхностной рекомбинации на боковой стенке НП. Причем, влияние поверхности возрастает наряду с ростом радиуса НП, что связано с увеличением отношения поверхности к объему.

Ключевые слова: арсенид галлия, поверхностная рекомбинация, нанопроволока, солнечный элемент.

1. Введение

В настоящее время интенсивно исследуются полупроводниковые НП с большим отношением длина/радиус, также проводятся разработки полевых транзисторов нового поколения, датчиков и СЭ [1–3] на их

основе. Методы синтеза НП, в частности метод роста пар-жидкость-кристалл, достигли такого уровня, что позволяют включить в полупроводниковую матрицу несколько материалов и сформировать единичную или массив НП с осевым или радиальным p-n- гомо (гетеро)- переходом. Это открывает новые возможности для понимания и использования таких уникальных физических свойств указанных систем, как: электрические или фотоэлектрические свойства, биологическая и химическая чувствительность, возникающие, главным образом, из большого отношения поверхности к объему [4]. НП соединения $A^{III}B^{V}$ могут выращиваться на несогласованных подложках, таких, как: Si, для реализации недорогих, но высокоэффективных фотоэлектрических устройств. Сообщается о многих недавних достижениях в выращивании наноструктур как на основе кремния, так и соединений типа $A^{III}B^{V}$ [5].

Одним из наиболее известных явлений в НП является чувствительность к свету, которая позволяет эффективно использовать их в качестве фотодетекторов и СЭ. Особый интерес представляют коаксиальные структуры, в которых легированное НП-ядро окружено оболочкой противоположного типа легирования, образуя p-n-переход в радиальном направлении. Общая физика устройства более или менее идентична физике стандартного СЭ с дополнительными преимуществами, заключающимися в том, что p-n-переход располагается вдоль длины НП, в результате, разделение носителей заряда происходит в радиальном направлении, а поглощение падающего излучения в более длинном – осевом направлении. Другими словами, такая вертикально выровненная НП позволяет получить взаимно перпендикулярные направления поглощения света и сбора носителей и, следовательно, обеспечить эффективный сбор носителей в оптически толстой НП.

Экспериментально доказано, что радиальная структура СЭ позволяет получать отличный фотовольтаический эффект и поэтому может

использоваться как источник энергии для различных наномасштабных электронных и оптоэлектронных устройств [6].

Однако все экспериментальные реализации СЭ на основе НП из GaAs показывают низкие значения напряжения холостого хода Voc (менее 0,4 В при стандартных условиях освещения AM 1.5G) по сравнению с обычными одиночными или поликристаллическими планарными элементами, где Voc типично 0,6–0,7 В [7].

Два физических эффекта могут быть ответственны за уменьшение абсолютной величины Voc в радиальном СЭ. Во-первых, оптимальные структуры СЭ должны иметь радиус ядра и оболочки, приблизительно равные диффузионным длинам неосновных носителей, также их уровень легирования должен быть достаточно высоким, чтобы НП данного радиуса не исчерпывалась полностью. При радиусе НП меньше ширины истощения, падение напряжения на p-n-переходе быстро уменьшается при уменьшении радиуса. Во-вторых, малое значение Voc вызвано высоким уровнем рекомбинации фотоносителей в области объемного заряда и на боковой поверхности. Роль поверхностной рекомбинации увеличивается при увеличении отношения поверхности к объему НП. Поскольку введение i-слоя между p-ядром и n-оболочкой в экспериментальных структурах СЭ не приводит к значительному улучшению Voc [6, 8], в настоящей работе рассматривается поверхностная рекомбинация как основной механизм, вызывающий спад значения Voc.

2. Описание модели

В работе рассматривается нанопроволока с радиальным p-n переходом из GaAs, которая показана на рисунке 1.

Рассматриваемая НП имеет радиус R и ядро с p-типом проводимости радиуса R_0. Нанопроволока освещается сверху, и свет поглощается в n- и p- областях, а также в слое пространственного заряда, в резуль-

тате чего имеет место генерация неравновесных носителей заряда. Неравновесные носители заряда, созданные в нанопроволоке, будут разделяться в поперечном направлении существующим в нем p-n переходом. Разделенные p-n переходом фотоносители участвуют в формировании фототока. В тех случаях, когда радиус НП меньше диффузионной длины, объемные рекомбинационные потери малы, но в этом случае большую роль играют рекомбинационные потери через поверхностные центры.

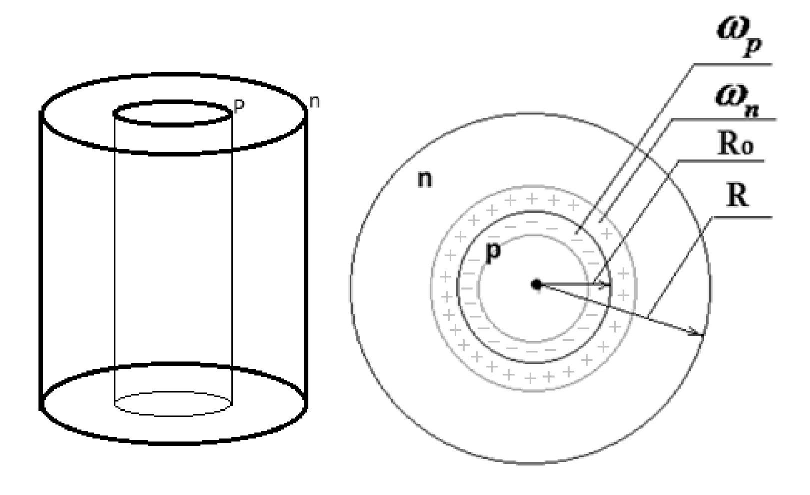


Рис. 1. Нанопроволока с радиальным p-n переходом (вид сбоку и сверху).

Для обеспечения полного поглощения света необходимо, чтобы длина нанопроволоки была больше глубины проникновения света α^{-1}. В этих условиях можно обеспечить максимальное поглощение света и разделение носителей заряда.

В дальнейших расчетах рассматривается спектр солнечного излучения АМ0, который представляет из себя излучение абсолютно черного тела при температуре T_c=5800 ^{0}K. Следовательно, плотность падающего потока фотонов равна [9]:

$$\frac{\Delta N_{Ph}}{\Delta\lambda} = \frac{A}{\lambda^4 (e^{\frac{b}{\lambda T_c}} - 1)}, \qquad (1)$$

где $A = 2\pi hc^2 \left(R_c / \mathrm{r}\right)^2 = 4.05 \cdot 10^4 \, м / сек$, $b = hc / k = 1,4388 \cdot 10^{-2} \, м \cdot K$, Rc=$6.96 \cdot 10^8$м – радиус Солнца и r =$1.5 \cdot 10^{11}$ м – среднее расстояние между Солнцем и Землей, h – постоянная Планка, c – скорость света, k – постоянная Больцмана.

Таким образом, коэффициент генерации электрон-дырочных пар в точке z равен:

$$\Delta G = \alpha(\lambda) \cdot e^{-\alpha(\lambda) z} \cdot \Delta N_{Ph} (1 - R), \qquad (2)$$

где α – коэффициент поглощения и *R*- коэффициент отражения.

Для расчета фототока в радиальном p-n переходе необходимо определить зависимость между высотой потенциального барьера и шириной области объемного заряда.

Для определения зависимости потенциала от координаты необходимо решить уравнение Пуассона в цилиндрических координатах [9]:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\varphi\right) = \begin{cases} -\dfrac{eN_D}{\varepsilon\varepsilon_0}, R_0 \le r \le R_0 + \omega_n \\ +\dfrac{eN_A}{\varepsilon\varepsilon_0}, R_0 - \omega_p \le r \le R_0 \end{cases}, \qquad (3)$$

$$\left.\frac{d\varphi}{dr}\right|_{r=R_0+\omega_n} = 0, \left.\frac{d\varphi}{dr}\right|_{r=R_0-\omega_p} = 0, \qquad (4)$$
$$\varphi(R_0 + \omega_n) = -\varphi_0, \varphi(R_0 - \omega_p) = 0.$$

Используя соответствующие стандартные граничные условия (4), где ω_n и ω_p – ширины области объемного заряда в n- и p- областях соответственно, ε- диэлектрическая проницаемость, e – элементарный заряд и ε_0 – диэлектрическая постоянная, N_A и N_D – уровни легирования областей ядра и оболочки, окончательно для ω_p получим [11]:

$$\gamma\frac{V_{bi} - V}{V_T} = x\ln x + (2 - x)\ln(2 - x), \qquad (5)$$

где введены обозначения: $x=\left(1-\frac{\omega_p}{R_0}\right)^2, \gamma=\frac{4\pi\varepsilon\varepsilon_0 V_T}{e^2 N_A R_0^2}$, $V_{bi}=\frac{kT}{e}\ln\frac{N_A N_D}{n_i^2}$ и V_T – тепловой потенциал (V_T = kT/e), n_i – собственная концентрация.

Для GaAs (n_i=2,1·10^6 cm^{-3}) с уровнем легирования N_A=N_D=10^{18} cm^{-3} при комнатной температуре получим:

$$V_{bi}=\frac{kT}{e}\ln\frac{N_A N_D}{n_i^2}\approx 0.9V.$$

Определяя значение x_0 из уравнения (5),найдем ширины ОПЗ в n- и p- областях НП:

$$\begin{aligned}\omega_p &= R_0\cdot\left(1-\sqrt{x_0}\right),\\ \omega_n &= R_0\cdot\left(\sqrt{2-x_0}-1\right).\end{aligned} \quad (6)$$

3. Вольт-амперная характеристика

Рассмотрим НП, которая излучается сверху световым потоком (1). Решая уравнение непрерывности для n и p областей с учетом соответствующих граничных условий, получим [11]:

$$-\frac{1}{e}\frac{dj_n}{dr}+dG-\frac{\Delta n}{\tau_n}=0,\quad 0\le r\le R_0-\omega_p \qquad -\frac{1}{e}\frac{dj_p}{dr}+dG-\frac{\Delta p}{\tau_p}=0,\quad R_0+\omega_n\le r\le R \quad (7)$$

$$\begin{cases}\Delta n(0)=const\\ \Delta n(R_0-\omega_p)=n_p(e^{\frac{eV}{kT}}-1)\end{cases}, \qquad \begin{cases}\Delta p(R_0+\omega_n)=p_n(e^{\frac{eV}{kT}}-1)\\ D_p\left.\frac{d\Delta p}{dr}\right|_{r=R}=S_p(p-p_n)\end{cases}, \quad (8)$$

где Δn и Δp – концентрации неравновесных носителей заряда, S_p – скорость поверхностной рекомбинации, $\tau_{n,p}$ – время жизни неосновных носителей, V – приложенное падение напряжения, T =300K.

Таким образом, для фототока в p- и n- квазинейтральных областях получим:

$$\Delta I_{n_l}^{(\lambda)} = 2\pi e D_n \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} \tau_n (1-e^{-\alpha L}) \Delta N_{Ph},$$
$$\Delta I_{p_l}^{(n)} = 2\pi \beta_2 e D_p \frac{(f_4 - f_5) S' - f_3}{f_2 \cdot S' - f_1} \cdot \tau_p (1-e^{-\alpha L}) \Delta N_{Ph}. \tag{9}$$

где введены обозначения:

$$\beta_1 = \frac{R_0 - \omega_p}{L_n}, \beta_2 = \frac{R_0 + \omega_n}{L_p}, \beta_3 = \frac{R}{L_p}, S' = S_p \sqrt{\tau_p / D_p},$$

L_n, L_p, D_n и D_p – длины и коэффициенты диффузии неосновных носителей.

$$f_1 = K_1(\beta_3) I_0(\beta_2) + K_0(\beta_2) I_1(\beta_3),$$
$$f_2 = K_0(\beta_3) I_0(\beta_2) - K_0(\beta_2) I_0(\beta_3),$$
$$f_3 = K_1(\beta_3) I_1(\beta_2) - K_1(\beta_2) I_1(\beta_3),$$
$$f_4 = K_0(\beta_3) I_1(\beta_2) + K_1(\beta_2) I_0(\beta_3),$$
$$f_5 = K_1(\beta_2) I_0(\beta_2) + K_0(\beta_2) I_1(\beta_2).$$

I_0, I_1, K_0 и K_1 – цилиндрические функции Бесселя.

В полупроводниковой НП также имеют место процессы генерации и рекомбинации в слое ОПЗ:

$$\Delta I_g^{dep,p} = \pi e(R_0^2 - (R_0 - \omega_p)^2) \cdot (1 - e^{-\alpha L}) \Delta N_{Ph},$$
$$\Delta I_g^{dep,n} = \pi e((R_0 + \omega_n)^2 - R_0^2) \cdot (1 - e^{-\alpha L}) \Delta N_{Ph},$$
$$I_r^{dep}(V) = \frac{\pi^2 L n_i R_0 kT}{\sqrt{\tau_n \tau_p} E(R_0)}.$$

где $E(R_0) = eN_A R_0(1-x_0)/2\,\varepsilon\,\varepsilon_0$ – максимальное значение электрического поля при $r = R_0$.

Следовательно, выражение для полного фототока:

$$I_l^{tot} = 2\pi e \cdot N'_{Ph} \cdot R_0^2 \left[\frac{\beta_1 D_n \tau_n}{R_0^2} \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} + \frac{\beta_2 D_p \tau_p}{R_0^2} \cdot \frac{(f_4 - f_5) S' - f_3}{f_2 \cdot S' - f_1} + \frac{1}{2} \left(\left(1 + \frac{\omega_n}{R_0^2}\right) - \left(1 - \frac{\omega_p}{R_0^2}\right) \right) \right]. \tag{10}$$

где $N'_{Ph} = \int_0^{hc/E_g} \frac{A(1-e^{-\alpha L})}{\lambda^4 (e^{\frac{b}{\lambda T_c}} - 1)} d\lambda$ – суммарный поток поглощения НП.

4. Результаты и обсуждение

В работе исследована зависимость фототока и напряжения холостого хода от радиуса и скорости поверхностной рекомбинации для СЭ на основе единичной GaAs-НП при различных значениях скорости поверхностной рекомбинации.

Рис. 2 показывает зависимость фототока от радиуса ширины квазинейтральной области оболочки НП. Из графика видно, что с ростом ширины n- оболочки имеет место рост значения фототока. Это объясняется ростом области поглощения фотонов и генерации электрон-дырочных пар. Начиная с некоторого значения отношения $(R-R_0-\omega_n)/L_p$, фототок достигает насыщения, что обусловлено влиянием объемной рекомбинации. Из рисунка также видно, что имеет место значительное уменьшение значения фототока, связанное с ростом скорости поверхностной рекомбинации: при $(R-R_0-\omega_n)/L_p=1$ с ростом S_p с 10^3 до 10^6 см/сек фототок спадает на ≈29%.

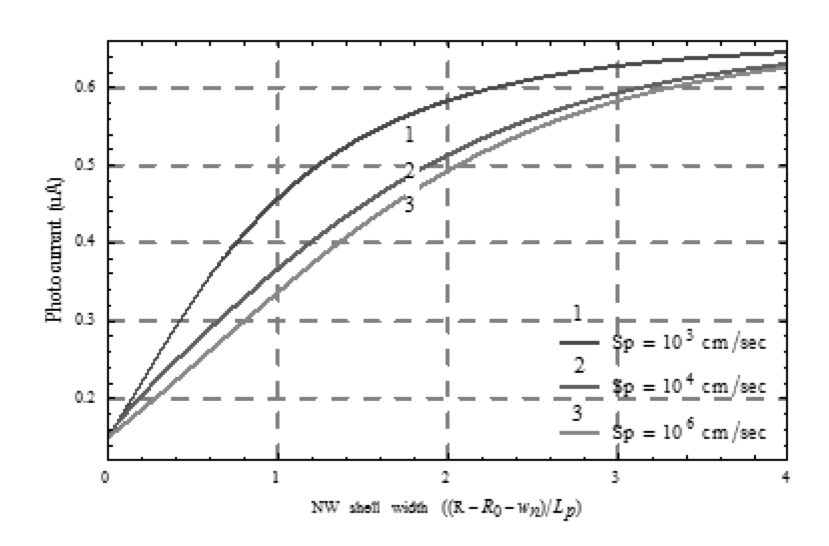


Рис. 2. Зависимость фототока от ширины квазинейтральной области оболочки для различных значений скорости поверхностной рекомбинации (GaAs-НП).

На рис. 3 показано изменение напряжения холостого хода от ширины квазинейтральной области оболочки НП для различных значений скорости поверхностной рекомбинации. На графике видно, что влияние поверхностной рекомбинации велико в области малых радиусов НП, при значениях радиуса больше диффузионной длины, поверхностные эффекты становятся несущественными и значение напряжения холостого хода достигает определенного постоянного значения. Подобный существенный спад значения V_{OC} под влиянием поверхностной рекомбинации является основной причиной низкого значения КПД в СЭ на основе НП с большим отношением объем/поверхность.

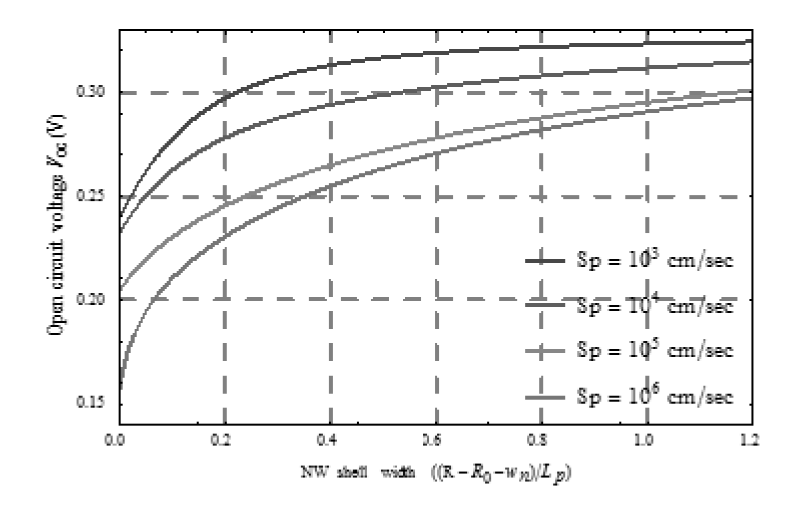


Рис. 3. Зависимость напряжения холостого хода от ширины квазинейтральной области оболочки для различных значений скорости поверхностной рекомбинации (GaAs-НП).

На рис. 4 показана зависимость напряжения холостого хода от скорости поверхностной рекомбинации. Влияние поверхности проявляется особенно сильно для НП с радиусами меньше диффузионной

длины. Для НП с радиусом порядка L_p, $2L_p$ спад значения V_{OC} очень мал.

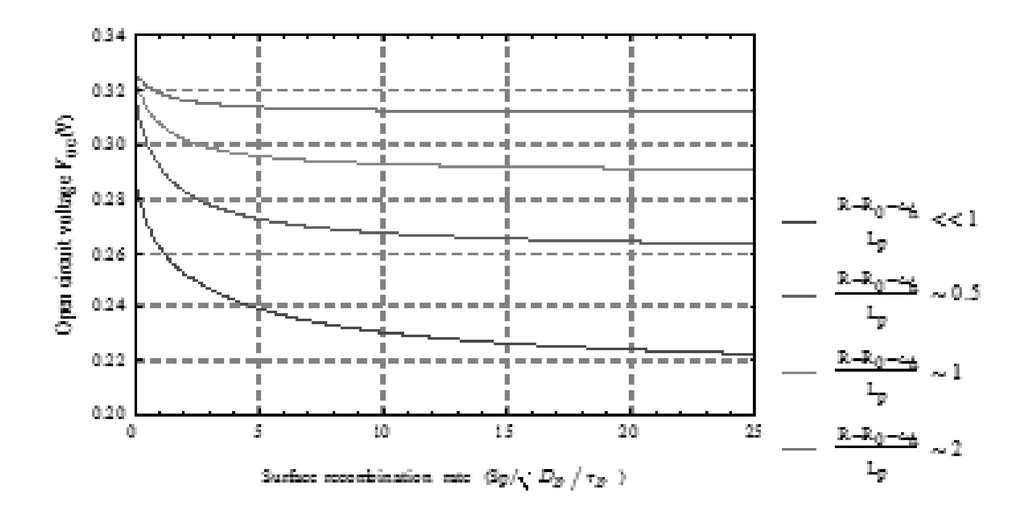


Рис. 4. Зависимость напряжения холостого хода от скорости поверхностной рекомбинации (GaAs-НП).

Заключение

Поверхностная рекомбинация приводит к резкому уменьшению фототока и напряжения холостого хода солнечного элемента, что, в свою очередь, влияет на эффективность преобразования. С ростом скорости поверхностной рекомбинации описанные выше явления становятся более существенными.

В работе была изучена одиночная GaAs-НП с радиальным p-n-переходом. Теоретический анализ выполнен для НП с большим диапазоном значений радиуса оболочки. Описана зависимость напряжения холостого хода от скорости поверхностной рекомбинации для НП с различными значениями радиуса, сравнимыми с диффузионными длинами носителей заряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Colombo C., Heib M., Gratzel M., Morral A.* Galium Arsenide p-i-n radial structures for photovoltaic applications. Appl. Phys.Lett. 2009, 94, 73108.
2. *Tian B., Zheng X., Kempa T., Fang Y., Yu N., Yu G., Huang J., Lieber Ch.* Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources. Nature 2007, 449. PP. 885–890.
3. *Tsakalakos L., Balch J., Fronheiser J., Korevaar* B. Silicon nanowire solar cells.Appl.Phys.Lett.2007, 91, 233117.
4. *Kelzenberg M., Turner-Evans D., Kayes B., Filler M., Putnam M., Lewis N., Atwater H.* Photovoltaic measurements in single-nanowire silicon solar cells. Nano Lett.2008, 8 (2). PP. 710–714, 2008.
5. *Jin H., Werner P., and Zacharias M.* Semiconductor Nanowires: From Self-Organization to Patterned Growth. Small 2006, 2 (6). PP.700–717.
6. *Tian B., Kempa Th., Lieber Ch.* Single Nanowire photovoltaics. Chem Soc. Rev. 2009, 38. PP. 16–24.
7. *Joseph D. Christesen, Xing Zhang, Christopher W. Pinion, Thomas A. Celano, Cory J. Flynn, and James F. Cahoon.* Design Principles for Photovoltaic Devices Based on Si Nanowires with Axial or Radial p−n Junctions. Nano Lett.2012, 12. PP. 6024−6029.
8. *Garnett E., Yang P.* Silicon Radial p-n Junction Solar Cells. J.Am. Chem. Soc. 2008, 13. PP. 9224–9225.
9. *Pikus G.* Fundamentals of the theory of semiconductor devices, Publish.: Science, Moscow, 1965.
10. *Petrosyan S., Yesayan A., Nersesyan S.* Theory of NW radial p-n junction. World Academy of Scince Engineering and Technology 2012, 71, 1065.

INFLUENCE OF SURFACE RECOMBINATION ON THE OPEN CIRCUIT VOLTAGE OF THE GAAS - NANOWIRE SOLAR CELLS WITH RADIAL P-N JUNCTION

V. Khachatryan

ABSTRACT

We have developed an analytic model for the radial p-n-junction in a GaAs nanowire (NW) core-shell structure to study the impact of surface recombination on photovoltaic performance of NW solar cell with radial p-n junction. It was found that low open circuit voltage experimentally often observed for such solar cells partially can be caused by large surface recombination at the NW sidewall. The role of which is increased as the diameters become smaller and the ratio of NW surface to volume is increased.

Keywords: gallium arsenide, surface recombination, nanowire, solar cell.

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ՌԵԿՈՄԲԻՆԱՑԻԱՅԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ GAAS-Ի P-N ԱՆՑՄԱՄԲ ՆԱՆՈԼԱՐԻ ԱՐԵՎԱՅԻՆ ԲՋԻՋՆԵՐԻ ՖՈՏՈԳԱԼՎԱՆԱՅԻՆ ՊԱՐԱՄԵՏՐԵՐԻ ՎՐԱ

Վ.Ա. Խաչատրյան

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Աշխատանքում ներկայացված պարզմոդելը՝ GaAs նանոլարը միջուկ-թաղանթ կառուցվածքով, թույլ է տալիս հետազոտել մակերևույթային ռեկոմ-բինացիայի ազդեցությունը արևային բջիջների ֆոտոգալվանային պարա-մետրերի վրա: Աշխատանքի արդյունքում ստացվել է, որ ցածր բաց հոսանքի լարումը նման կառուցվածքներում պայմանավորված է խոշոր մակերեսային ռեկոմբինացիայով, ինչի դերը մեծանում է տրամագծի փոքրացմանը զուգ-ընթաց եւ մակերես/ծավալ հարաբերակցության ավելացմամբ:

Հիմնաբառեր՝ գալիումի արսենիդ, մակերևույթային ռեկոմբինացիա, նանոլար, արևային բջիջ:

ХИМИЯ

УДК 547.874.789.781

SYNTHESIS OF BIHETEROCYCLIC SYSTEMS DERIVATIVES BASED ON 4,6-DIAMINO SUBSTITUTED N^1-(1,3,5-TRIAZIN-2-YL)ETHANE-1,2-DIAMINES

***A.P. Yengoyan*[1,2], *Zh. A. Azaryan*[1], *V.A. Pivazyan*[2], *E.A. Ghazaryan*[2]**

[1]*Russian-Armenian University*
[2]*National Agrarian University of Armenia*

ayengoyan@mail.ru

ABSTRACT

On the basis of 4,6-diamino substituted N^1-(1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamine the simple, accessible and effective methods for the synthesis of biheterocyclic systems derivatives with a combination of 1,3,5-triazine ring with 1,3-thiazole or imidazole cycle in the same molecule, were carried out.

Keywords: 1,3,5-triazine, 1,3-thiazole, imidazole, heterocyclization,

Introduction

Derivatives of five- and six-membered heterocycles exhibit a wide diversity of biological activity. A large number of compounds synthesized

on the basis of 1,3,5-triazine, imidazole and 1,3-thiazole are used in medicine [1] and industry.

In agriculture the 1,3,5-triazine derivatives are widely used, mainly to control weeds. These include chloro-, fluoroalkyl-, methoxy- and methylthio substituted triazines, triazinone derivatives. A special place is occupied by triazinylsulfonylurea herbicides, which are characterized by high efficiency, very low application rates and low toxicity [2].

The spectrum of pesticidal activity of 1,3-thiazole derivatives is much more diverse. Among them the chemical means of plant protection are known, which are used as fungicides (ethaboxam, isotianil, metsulfovax, octhilinone, thiabendazole, thifluzamide, flutianil, thiadifluor), insecticides (clothianidin, imidaclothiz, thiamethoxam, thiapronil, tazimcarb, thiacloprid) and bactericides (amicathiazol) [2].

Preparations synthesized on the basis of imidazole also take a worthy place among the pesticides used. A series of imidazole derivatives are known and widely used as fungicides (cyazofamid, fenamidone, fenapanil, glyodin, iprodione, isovaledione, pefurazoate, triazoxide) and herbicides (imaza-methabenz, imazamox, imazapic, imazapyr, imazaquin, imazethapyr) [2].

However, in the literature there is very few data on the pesticidal and growth-regulating activity of such compounds, in which molecules these heterocycles are present simultaneously. In connection with this, the purpose of this study was to develop simple, accessible and effective methods for the synthesis of a series of compounds with a combination of 1,3,5-triazine ring with 1,3-thiazole or imidazole cycle in the same molecule to search for new pesticides and plant growth regulators.

Results and discussion

The reaction of initial 4,6-diamino substituted N^1-(1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamines (**1**) with potassium rhodanide and hydrochloric acid afforded corresponding thiourea derivatives (2). Their heterocyclization with

ethyl 2-chloro-3-oxobutanoate and 3-chloropentane-2,4-dione led to ethyl 2-((2-((4,6-disubstituted-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)amino)-4-methylthiazole-5-carboxylates (**3**) and 1-(2-((2-((4,6-disubstituted-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)amino)-4-methylthiazol-5-yl)ethan-1-ones (**4**), respectively.

R = R[1] = $N(CH_3)_2$; $N(CH_2CH_2)_2O$; $N(CH_2)_6$

On the other hand by heterocyclization of initial reagent` (**1**) with carbon disulfide and triethylamine the compounds with a combination of 1,3,5-triazine and imidazole cycles in the molecule (**5**) were obtained. The reaction of these compounds with acetic anhydride and benzene isocyanat afforded 1-(3-(4,6- disubstituted-1,3,5-triazin-2-yl)-2-thioxoimidazolidin-1-yl)ethan-1-ones (**6**) and 3-(4,6-disubstituted-1,3,5-triazin-2-yl)-N-phenyl-2-thioxoimidazolidine-1-carboxamides (**7**).

In NMR spectra of all compounds, two groups of signals are observed for the protons of the alkyl groups of the amine substituents of positions 4

and 6. This is explained by the process of hindered internal rotation of these groups around the N-heterocycle bond. This phenomenon is discussed in detail in [3]. In addition, a similar process of hindered rotation also takes place around the amide bond in compounds **6** and **7**, as a result of which two sets of NMR signals are also observed for the methyl group of the acyl substituent and the methylene groups of the imidazole ring.

Experimental

General

The ^{1}H and ^{13}C NMR spectra were recorded at 30 ^{0}C on Varian Mercury-300 (300 and 75 MHz appropriately) spectrometer with standard pulse sequences operating in the mixture of solvents DMSO-d_6 and CCl_4 (1:3), using tetramethylsilane (0.0 ppm) as internal standard. The NMR multiplicities *brs*, *s*, *d*, *t*, *q*, and *m* stand for broad singlet, singlet, doublet, triplet, quartet and multiplet, respectively. The reaction progress and purity of the obtained substances were checked by using the TLC method on "Silufol UV-254" plates and acetone/hexane mixture (2:1) as eluent. All melting points were determined in open capillaries and are uncorrected.

Synthesis of compounds 1a-c

To 10 mL of ethane-1,2-diamine, at cooling (-5 – 0 ^{0}C) 0.01 mol of 2,4-bis-diamino substituted 1,3,5-triazine was added by portion. The mixture was stirred at 125 ^{0}C for 4 h, then ethane-1,2-diamine was evaporated at low pressure. The residue was processed with minimal amount of cold water and filtered off.

N^{1}-(4,6-Bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamine (1a). Yield 65%, mp 136-140 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.82 and 3.26 (m,m, 4H, CH_2CH_2); 3.07 (brs, 12H, $2N(CH_3)_2$); 3.75 (brs, 2H, NH_2); 6.35 (t, J=5.0 Hz, 1H, NH).

N^1-(4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamine (1b). Yield 72%, mp 154-156 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.82 and 3.28 (m,m, 4H, CH_2CH_2); 3.60-3.85 (m, 16H, 2morphol.); 3.73 (brs, 2H, NH_2); 6.42 (t, J=5.0 Hz, 1H, NH).

N^1-(4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamine (1c). Yield 68%, mp 110-112 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.45-1.60 and 1.63-1.80 (m,m, 16H, $N(CH_2)_8$); 2.85 and 3.30 (m,m, 4H, CH_2CH_2); 3.57-3.70 (m, 10H, NH_2 and $N(CH_2)_4$); 6.35 (t, J=5.0 Hz, 1H, NH).

Synthesis of compounds 2a-c

To a solution of potassium rhodanide (0.015 mol) and HCl (0.015 mL) in 15 mL of ethanol, at heating 0.01 mol of compound **1** was added by portion, then the heating was continued for 2 h. The salt was filtered off, ethanol was evaporated from filtrate, the residue was processed with minimal amount of water and filtered off.

1-(2-((4,6-Bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl) thiourea (2a). Yield 74%, mp 160-162 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.99 and 3.52 (t,t, J=5.7 Hz, NCH_2CH_2N); 3.07 (s, 12H, $2N(CH_3)_2$); 6.44 and 7.77 (brt, J=5.7 Hz, 2NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 35.35, 37.75, 39.14, 164.79, 165.20.

1-(2-((4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)thiourea (2b). Yield 77%, mp 168-169 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.95 and 3.50 (t,t, J=5.7 Hz, NCH_2CH_2N); 3.60-3.85 (m, 16H, 2morphol.); 6.40 (t, J=5.0 Hz, 1H, NH); 7.80 (brs, 3H, NH and NH_2).

1-(2-((4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)thiourea (2c). Yield 89%, mp 115-117 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.45-1.57 and 1.63-1.80 (m,m, 16H, $N(CH_2)_8$); 2.98 and 3.50 (m,m, 4H, CH_2CH_2); 3.63 (t, J=8.1 Hz, 8H, $N(CH_2)_4$); 6.35 (t, J=5.0 Hz, 1H, NH); 7.80 (brs, 3H, NH and NH_2). ^{13}C NMR, δ ppm: 26.40, 26.63, 27.38, 27.83, 37.92, 39.27, 45.83, 164.15, 165.55.

Synthesis of compounds 3,4a-c

The mixture of compound 2 (0.01 mol), 0.01 mol of ethyl 2-chloro-3-oxobutanoate (or 3-chloropentane-2,4-dione), K_2CO_3 (0.01 mol) and 20 mL of ethanol was heated at 70-80 ^{0}C for 5 h. Ethanol was exaporated, the precipitate processed with water and filtered off. Purified by recrystallization from ethanol or its 50% water solution.

Ethyl 2-((2-((4,6-bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl) amino)-4-methylthiazole-5-carboxylate (3a). Yield 75%, mp 173-175 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.30 (t, J=7.1 Hz, 3H, $\mathit{CH_3}$$CH_2O$); 2.42 (s, 3H, CH_3); 3.07 (brs, 12H, 2N$(CH_3)_2$); 3.38 and 3.52 (m,m, J_1=5.8 Hz, J_2=5.0 Hz, 4H, NCH_2CH_2N); 4.18 (q, J=7.1 Hz, 2H, $CH_3$$\mathit{CH_2}$O); 6.23 and 8.08 (t,t, J=5.0 Hz, 2H, 2NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 14.08, 16.92, 35.32, 39.02, 44.79, 58.91, 159.04, 161.34, 164.95, 165.37, 169.71.

Ethyl 2-((2-((4,6-dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)amino) - 4-methylthiazole-5-carboxylate (3b). Yield 70%, mp 96-98 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.33 (t, J=7.1 Hz, 3H, $\mathit{CH_3}$$CH_2O$); 2.40 (s, 3H, CH_3); 3.38 and 3.52 (m,m, J_1=5.8 Hz, J_2=5.0 Hz, 4H, NCH_2CH_2N); 3.60-3.86 (m, 16H, 2morphol.); 4.20 (q, J=7.1 Hz, 2H, $CH_3$$\mathit{CH_2}$O); 7.40 and 8.20 (brt, J=5.0 Hz, 2H, 2NH).

Ethyl 2-((2-((4,6-di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl) amino) - 4-methylthiazole-5-carboxylate (3c). Yield 88%, mp 105-107 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.30 (t, J=7.1 Hz, 3H, $\mathit{CH_3}$$CH_2O$); 1.50-1.62 and 1.67-1.82 (m,m, 16H, $(CH_2)_8$-azep.); 2.40 (s, 3H, CCH_3); 3.40-3.80 (m, 12H, CH_2CH_2 and N$(CH_2)_4$); 4.18 (q, J=7.1 Hz, 3H, $CH_3$$\mathit{CH_2}$O); 7.40 and 8.20 (brt, 2H, 2NH).

1-(2-((2-((4,6-Bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl) amino)-4-methylthiazol-5-yl)ethan-1-one (4a). Yield 78%, mp 258-259 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.30 (s, 3H, $COCH_3$); 2.44 (s, 3H, CCH_3); 3.07-3.22 (brs, 12H, 2N$(CH_3)_2$); 3.43-3.70 (m, 4H, NCH_2CH_2N); 8.33 (brs, 2H, 2NH).

1-(2-((2-((4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)amino) -4-methylthiazol-5-yl)ethan-1-one (4b). Yield 75%, mp 200-202 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.25 (s, 3H, $COCH_3$); 2.42 (s, 3H, CCH_3); 3.40-3.70 (m, 4H, NCH_2CH_2N); 3.60-3.85 (m, 16H, 2-morphol.); 7.70 and 8.15 (brs, 2H, 2-NH).

1-(2-((2-((4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)amino)ethyl)amino) -4-methylthiazol-5-yl)ethan-1-one (4c). Yield 91%, mp 78-79 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.50-1.62 and 1.64-1.85 (m,m, 16H, $(CH_2)_8$-azep.); 2.30 (s, 3H, $COCH_3$); 2.40 (s, 3H, CCH_3); 3.40-3.80 (m, 12H, CH_2CH_2 and $N(CH_2)_4$); 7.75 and 8.30 (brs, 2H, 2NH).

Synthesis of compounds 5a-c

To a suspension of compound **1** (0.01 mol) in benzene (10 mL), at stirring 0.015 mol of triethylamine was added dropwise, then 0.015 mol of CS_2. The mixture was allowed to stand overnight at room temperature, then heated at 50-60 ^{0}C for 3 h, filtered off, and the precipitate was washed with water.

1-(4,6-bis(Dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)imidazolidine-2-thione (5a). Yield 75%, mp 220-222 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 3.10-3.24 (brs, 12H, $2\times N(CH_3)_2$); 3.50 and 4.22 (m,m, 4H, NCH_2CH_2N); 8.85 (brs, 1H, NH).

1-(4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)imidazolidine-2-thione (5b). Yield 60%, mp 230-232 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 3.52 and 4.20 (m,m, 4H, CH_2CH_2); 3.59-3.82 (m, 16H, 2morphol.); 8.93 (s, 1H, NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 40.32, 43.24, 47.44, 65.89, 162.86, 164.36, 179.64.

1-(4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)imidazolidine-2-thione (5c). Yield 62%, mp 245-246 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.50-1.58 and 1.70-1.80 (m,m, 16H, $(CH_2)_8$-azep.); 3.52 and 4.21 (t,t, J=8.8 Hz, 4H, CH_2CH_2); 3.67 and 3.73 (t,t, J=6.0 Hz, 8H, $N(CH_2)_4$-azep.); 8.74 (s, 1H, NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 26.31, 26.49, 27.09, 27.60, 40.28, 46.03, 46.16, 47.60, 162.64, 164.17, 179.88.

Synthesis of compounds 6a-c

The mixture of compound 5 (0.01 mol) and 10 mL of acetic anhydride was heated at 140 ^{0}C for 5 h. Anhydride was removed and the residue was washed with water. A few drops of NH_4OH was added and the precipitate was filtered off.

1-(3-(4,6-Bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)-2-thioxoimidazo-lidin-1-yl)ethan-1-one (6a). Yield 86%, mp 140-142 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.45 and 2.77 (s.s., 3H, $COCH_3$); 3.13-3.14 (brs, 12H, $2NCH_3)_2$); 3.71-4.16 (m, 4H, CH_2CH_2).

1-(3-(4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)-2-thioxoimidazolidin-1-yl)ethan-1-one (6b). Yield 96%, mp 203-205 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 2.40 and 2.75 (s.s., 3H, $COCH_3$); 3.60-3.85 (m, 16H, 2 morphol.); 3.70-4.20 (m, 4H, NCH_2CH_2N).

1-(3-(4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)-2-thioxoimidazolidin-1-yl)ethan-1-one (6c). Yield 87%, mp 134-136 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.48-1.60 and 1.70-1.80 (m,m, 16H, $(CH_2)_8$-azep.); 2.40 and 2.72 (s.s., 3H, $COCH_3$); 3.65 and 3.71 (t,t, J=6.0 Hz, 8H, $N(CH_2)_4$-azep.); 3.72-4.18 (m, 4H, NCH_2CH_2N).

Synthesis of compounds 7a-c

To a mixture of compound **5** (0.01 mol) in 10 mL of toluene, 0.01 mol of phenyl isocyanate (0.01 mol) and catalitic amount of pyridine was added dropwise at cooling. The mixture was boiled for 2 h, then benzene was evaporated, the precipitate was processed with hexane and filtered off. Purified by recrystallization from ethanol or its 50% water solution.

3-(4,6-Bis(dimethylamino)-1,3,5-triazin-2-yl)-N-phenyl-2-thioxoi-midazolidine-1-carboxamide (7a). Yield 80%, mp 197-199 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ

ppm: 3.16 (s, 12H, 2N$CH_3)_2$); 4.10-4.20 (m, 4H, CH_2CH_2); 7.03-7.55 (m, 5H, C_6H_5); 12.68 (s, 1H, NH).

3-(4,6-Dimorpholino-1,3,5-triazin-2-yl)-N-phenyl-2-thioxoimidazolidine-1-carboxamide (7b). Yield 84%, mp 213-214 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 3.58-3.90 (m, 16H, 2morphol.); 4.18 (s, 4H, CH_2CH_2); 7.00-7.57 (m, 5H, C_6H_5); 12.62 (s, 1H, NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 43.25, 43.29, 43.34, 43.40, 43.46, 44.07, 65.80, 119.05, 123.01, 128.27, 137.37, 149.43, 163.18, 164.25, 175.89.

3-(4,6-Di(azepan-1-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)-N-phenyl-2-thioxoimidazolidine-1-carboxamide (7c). Yield 88%, mp 172-173 ^{0}C. ^{1}H NMR, δ ppm: 1.51-1.61 and 1.72-1.82 (m,m, 16H, $(CH_2)_8$-azep.); 3.70 and 3.73 (t,t, J=5.9 Hz, 8H, N$(CH_2)_4$-azep.); 4.12-4.20 (m, 4H, CH_2CH_2); 7.03-7.55 (m, 5H, C_6H_5); 12.72 (s, 1H, NH). ^{13}C NMR, δ ppm: 26.28,26.33, 26.89, 27.56, 43.33, 44.13, 46.18, 119.05, 122.88, 128.22, 137.50, 149.60, 162.87, 164.09, 175.88.

REFERENCES

1. *Richards D., Coleman J., Reynolds J., Aronson J.* Oxford Handbook of Practical Drug Therapy, Oxford; New York: Oxford University Press, (2011).
2. http://www.alanwood.net/pesticides/class_pesticides.html
3. *Енгоян А.П., Мамян С.С., Гомкцян Т.А., Амбарцумян Э.Н., Ворсканян А.С., Довлатян В.В., Элиазян К.А., Пивазян В.А.;* ХГС, № 8, 1236–1239, (2005).

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ БИОТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ 4,6-ДИАМИНОЗАМЕЩЕННЫХ N^1-(1,3,5-ТРИАЗИН-2-ИЛ)ЭТАН-1,2-ДИАМИНОВ

А.П. Енгоян, Ж.А. Азарян, В.А. Пивазян, Е.А. Казарян

АННОТАЦИЯ

На основе 4,6-диаминозамещенного N^1-(1,3,5-триазин-2-ил)этан-1,2-диаминов разработаны простые, доступные и эффективные методы синтеза производных бигетероциклических систем с комбинацией 1,3,5-триазинового кольца с 1,3-тиазольным или имидазольным циклами в молекуле.

Ключевые слова: 1,3,5-триазин, 1,3-тиазол, имидазол, гетероциклизация.

ԲԻՀԵՏԵՌՈՑԻԿԼԻԿ ՀԱՄԱԿԱՐԳԵՐԻ ԱԾԱՆՑՅԱԼՆԵՐԻ ՍԻՆԹԵԶԸ 4,6-ԴԻԱՄԻՆՈՏԵՂԱԿԱԼՎԱԾ N^1-(1,3,5-ՏՐԻԱԶԻՆ-2-ԻԼ)ԷԹԱՆ-1,2-ԴԻԱՄԻՆՆԵՐԻ ՀԻՄՔԻ ՎՐԱ

Ա.Փ. Ենգոյան, Ժ.Ա. Ազարյան, Վ.Ա. Պիվազյան, Է.Ա. Ղազարյան

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

4,6-Դիամինոտեղակալված N^1-(1,3,5-տրիազին-2-իլ)էթան-1,2-դիամինների հիմքի վրա մշակվել են 1,3,5-տրիազինային օղակի և 1,3-թիազոլի կամ իմիդազոլի ցիկլերի համադրությամբ բիհետերոցիկլիկ համակարգերի ածանցյալների սինթեզի պարզ, մատչելի և արդյունավետ եղանակներ:

Հիմնաբառեր՝ 1,3,5-տրիազին, 1,3-թիազոլ, իմիդազոլ, հետերոցիկլում:

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Ж.А. Азарян	аспирант первого года обучения кафедры общей и фармацевтической химии РАУ
А.К. Андриасян	аспирант кафедры молекулярной физики ЕГУ
А.В. Асатрян	аспирант кафедры молекулярной физики ЕГУ
А.П. Енгоян	д.х.н., профессор, профессор кафедры общей и фармацевтической химии РАУ, зав.лабораторией защиты растений и синтеза пестицидов АНАУ
Е.А. Казарян	к.х.н., старший научный сотрудник лаборатории защиты растений и синтеза пестицидов АНАУ
А.П. Карабахцян	студент второго курса магистратуры по направлению подготовки «Прикладная математика и информатика» РАУ
В.М. Кахкцян	к.ф.-м.н., доцент кафедры математики Московского института стали и сплавов
Е.Ш. Мамасахлисов	д.ф.-м.н., доцент кафедры молекулярной физики ЕГУ
В.Н. Маргарян	д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры математики и математического моделирования РАУ

А.В. Минасян	аспирант третьего года обучения кафедры дискретной математики и теоретической информатики ЕГУ
В.Ф. Морозов	д.ф.-м.н., профессор кафедры молекулярной физики ЕГУ
Г. Петросян	студент второго курса магистратуры факультета информатики и прикладной математики ЕГУ
В.А. Пивазян	к.х.н., ведущий научный сотрудник лаборатории защиты растений и синтеза пестицидов АНАУ
Ш.А. Тоноян	к.ф.-м.н., научный сотрудник лаборатории физики макромолекул
А.Х. Хачатрян	д.ф.-м.н., профессор, зав.кафедрой высшей математики и теоретической механики Армянского национального аграрного университета
А.А. Чубарян	д.ф.-м.н., профессор кафедры математической кибернетики РАУ, профессор кафедры дискретной математики и теоретической информатики ЕГУ

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

A. Chubaryan, A. Karabakhtsyan, G. Petrosyan. On some properties of several proof systems for non classical propositional logics ……..…… *5*

В.Н. Маргарян. Гипоэллиптичность и почти гипоэллиптичность в терминах сравнения подмногочленов …………………………………. *18*

A. Minasyan. On two represantations of cosets ………………………….. *27*

А.Х. Хачатрян, В.М. Кахкцян. Однопараметрическое семейство нетривиальных решений для одного класса квазилинейных уравнений типа Вольтерра ………………………………...................................... *33*

Физика

А.В. Асатрян, А.К. Андриасян, Ш.А. Тоноян, Е.Ш. Мамасахлисов, В.Ф. Морозов. Переход порядок-беспорядок в гетерогенных биологических макромолекулах ………………………………………………….. *41*

В.А. Хачатрян. Влияние поверхностной рекомбинации на напряжение холостого хода нанопроволоки из арсенида галлия ………………. *55*

Химия

A.P. Yengoyan, J.A. Azaryan, V.A. Pivazyan, E.A. Ghazaryan. Synthesis of biheterocyclic systems derivatives based on 4,6-diamino substituted n[1]-(1,3,5-triazin-2-yl)ethane-1,2-diamines ……………………….……….… *67*

Сведения об авторах …………………………………………….……… *77*

Главный редактор РНИ – *М.Э. Авакян*
Редактор – *Э.А Рухкян*
Корректор – *М.Р. Тадевосян*
Комьютерная верстка – *А.Г. Антонян*

Адрес Редакции научных изданий
Российско-Армянского
университета:

0051, г. Ереван, ул. Овсепа Эмина, 123
тел./факс: (+374 10) 27-70-52 (внутр. 42-02)
e-mail: redaction.rau@gmail.com

Заказ № 17
Подписано к печати 16.05.2018г.
Формат 70x100$^{1}/_{16}$. Бумага офсетная № 1.
Объем 5 усл. п.л. Тираж 200 экз.